

Mehrfeldmodellierung von Beton mit diskreten Element Methoden

Christian Flack

**Institut für Statik
Technische Universität Braunschweig**

Bericht Nr.125



Mehrfeldmodellierung von Beton mit diskreten Element Methoden

Von der
Fakultät Architektur, Bauingenieurwesen und Umweltwissenschaften
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina
zu Braunschweig

zur Erlangung des Grades eines
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

Dissertation

von
Christian Flack
geboren am 22. Juli 1989
aus Vechelde

Eingereicht am: 22. Juli 2019
Disputation am: 11. September 2019

Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. Dieter Dinkler
Prof. Dr. Thomas Sonar

2019

Von der Fakultät Architektur, Bauingenieurwesen und Umweltwissenschaften
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig
zur Erlangung des Grades
eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation

Eingereicht am: 22. Juli 2019
Disputation am: 11. September 2019
Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. Dieter Dinkler
Prof. Dr. Thomas Sonar

ISBN 978-3-926031-26-6

Herausgeber: Prof. Dr.-Ing. Dieter Dinkler

©Institut für Statik, Technische Universität Braunschweig, 2019

Kurzfassung

Bauwerke aus Beton sind im Bauwesen weit verbreitet. Die Bauweise ist vergleichsweise kostengünstig und in der Regel durch eine hohe Dauerhaftigkeit und lange Nutzbarkeit gekennzeichnet. Die Umweltbedingungen sind je nach Einsatzzweck sehr variabel und müssen bereits beim Entwurf der Betonrezeptur berücksichtigt werden. Immer wieder kommt es dennoch zu Schäden an Betonbauwerken, die eine erhebliche Verkürzung der Lebensdauer zur Folge haben können. Die Erfassung und Bewertung der Schäden ist für eine Prognose der Restlebensdauer unerlässlich.

In dieser Arbeit wird ein numerisches Modellierungskonzept auf Basis diskreter Elemente vorgestellt, welches den Beton auf der Mesoskala beschreibt. Die Prozesse auf dieser und den darunter liegenden Ebenen bestimmen maßgeblich die makroskopischen Eigenschaften. Das heterogene Gefüge wird mit Partikelpackungen unterschiedlicher Korngrößenverteilungen beschrieben. Zur Reduzierung des numerischen Aufwandes wird der Zementstein über die Kontaktbedingungen berücksichtigt und nur die Gesteinskörnung explizit abgebildet. Neben dem mechanischen Verhalten sind auch thermische und chemische Einflüsse sowie deren Wechselwirkungen im Modell erfasst.

Zu den höchsten thermischen Belastungen eines Bauteils zählt der Brandfall, dessen thermo-mechanische Auswirkungen mit dem Modell beschrieben werden können. Mögliche Betonabplatzungen infolge starker Temperaturgradienten werden über Bruchbedingungen erfasst. Der Wärmetransport erfolgt mit Hilfe thermischer Verbindungselemente zwischen einzelnen Partikeln.

Die Eigenschaften des erhärteten Betons werden maßgeblich durch die Wahl der Zusammensetzung bestimmt. Die Hydratationsreaktionen der Zementsteinphasen sorgen für die Festigkeit und setzen eine hohe Menge an Wärmeenergie frei. Ein vereinfachendes Hydratationsmodell zeigt die chemisch-thermische Kopplung.

Für die Beschreibung von Transportprozessen wird ein Poren-Netzwerk Modell verwendet, das auf der Basis einer radikalen VORONOI-Tessellation erstellt wird. Prozesszonen verknüpfen das Poren-Netzwerk mit dem Festkörpermodell und werden zur Berechnung beliebiger chemischer Reaktionen genutzt. Als Beispiel für die chemo-thermisch-mechanische Kopplung wird der Sulfatangriff gezeigt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Skalen	1
1.2	Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	3
2	Einführung in die diskrete Elemente Methode	5
2.1	Kontaktsuche und Auswertung	6
2.2	Zeitintegration	9
2.3	Zeitschrittweite	10
2.4	Dämpfungsverhalten	10
2.5	Kontaktsuche	11
2.5.1	Linked-cell Algorithmus	11
2.5.2	Cross-level-search	12
2.6	Spannungsberechnung	13
2.7	Randbedingungen	13
2.8	Definition von Festkörperkontakten	14
2.9	Bruchbedingungen	15
3	Packungen	17
3.1	Gleichförmige Packungen	17
3.2	Zufällige Packungen	18
3.2.1	Sieblinien	18
3.3	Charakterisierung der Packungen	22
3.3.1	Isotropie	22
3.3.2	Homogenität der Partikelpositionen	23
3.3.3	Koordinationszahl	25
3.3.4	Zufälligkeit	27
3.4	Materialparameter	29
3.4.1	Bestimmung der Querdehnzahl	30
3.4.2	Steifigkeit	32
3.4.3	Druckfestigkeit	33
3.4.4	Zugfestigkeit	39
4	Modellierung der Wärmeleitung und -speicherung	43
4.1	Diskretisierung der Energiebilanz	43
4.1.1	Bestimmung des Wärmewiderstands	45
4.1.2	Diskretisierung im Zeitbereich	47
4.1.3	Programmablauf und Randbedingungen	48
4.2	Validierung	49
4.2.1	Wärmeleitung	50

4.2.2	Wärmespeicherung	52
4.2.3	Konvektive Randbedingung	53
4.3	Thermisch-mechanische Kopplung	54
4.3.1	Eingespannter Würfel	55
4.3.2	Zwängungsfreie Lagerung	57
5	Poren-Netzwerk-Modell	61
5.1	Modellierung des Porenraums	62
5.2	Randbedingungen	65
5.3	Porengrößen	65
5.4	Validierung	67
5.4.1	Diffusionsprozesse	67
5.4.2	Stationäre Diffusion	68
5.5	Permeabilität	69
5.6	Zeitschrittweite	70
6	Chemische Reaktionen	71
6.1	Reaktionskinetik	72
6.2	Chemisch-thermische Kopplung	72
6.3	Chemisches Gleichgewicht	73
6.4	Numerische Realisierung	74
7	Anwendungsbeispiele	77
7.1	Brandfall	77
7.2	Hydratation	83
7.2.1	Reaktion der Hauptklinkerphasen	83
7.2.2	Reaktionskinetik	86
7.2.3	Anwendungsbeispiel	87
7.3	Sulfatangriff	92
7.3.1	Reaktionskinetik	92
7.3.2	Schädigung	94
7.3.3	Anwendungsbeispiel	95
8	Zusammenfassung und Ausblick	103
	Notationen	i
	Literaturverzeichnis	v

1 Einleitung

Beton ist der am häufigsten verwendete Baustoff im Bauwesen. Er lässt sich gut verarbeiten und auf vielerlei Weise einsetzen. Die wesentlichen Bestandteile sind Zement, Gesteinskörnung, Wasser und eventuelle Zusatzstoffe wie Fließmittel. Je nach Einsatzbedingungen sind unterschiedliche Mischungen notwendig. Die mechanischen Eigenschaften sind mit geeigneten Betonrezepturen steuerbar. Trotzdem bleibt jede Mischung einzigartig und eine Qualitätskontrolle ist für jede erzeugte unerlässlich. Dazu dienen begleitend zum zu betonierenden Bauteil erstellte Probekörper, die im Labor auf die mechanischen und chemischen Eigenschaften untersucht werden können.

Die Mischungszusammensetzung und die daraus resultierenden Reaktionen können im Voraus mit Modellen beschrieben werden. Weit verbreitet ist das Hydratationsmodell nach BENTZ [10], mit dem die Hydratation und die Entwicklung der Mikrostruktur von Portlandzementen simuliert werden kann. Anstelle von Versuchen werden numerische Simulationen durchgeführt, die eine Vielzahl an Parameter-Variationen abdecken und so zu einer optimalen Mischung beitragen. Neben den beteiligten Reaktionen muss auch die Hydratationskinetik bekannt sein. In der modernen Betonindustrie kommen immer mehr Zusatzmittel zum Einsatz, die Einfluss auf die Gefügeentwicklung und Reaktionsgeschwindigkeiten nehmen können. KRAUSS [30] untersucht in seiner Arbeit die Auswirkung hochfeiner inerter Zusatzstoffe auf die Hydratationskinetik. Die heutige Betontechnologie ermöglicht die individuelle Anpassung der Betongüte und -qualität an den jeweiligen Einsatzbereich. Die immer größeren Anforderungen und Einsatzmöglichkeiten erfordern neben experimentellen auch numerische Untersuchungen, die unterstützend in der Auswahl der geeigneten Zusammensetzung sein können. Zum Nachweis der Dauerhaftigkeit eines Bauwerks und zur Bewertung der Restlebensdauer können ebenfalls numerische Untersuchungen durchgeführt werden.

1.1 Skalen

Die Berechnung von Tragwerken erfordert eine Betrachtung auf unterschiedlichen Skalen. Übliche Bezeichnungen sind dabei die Makro-, Meso-, Mikro- und Nanoskala. Um die Tragsicherheit eines Bauwerks zu gewährleisten ist die Berechnung von Schnittgrößen und Verformungen auf der Makroskala notwendig. Die Beschreibung des globalen Tragverhaltens kann jedoch nicht ohne Materialmodelle erfolgen. Die unterschiedlichen Baustoffe im Bauwesen sind geprägt durch Prozesse, die auf den unteren Skalen (Nano, Mikro, Meso) ablaufen. Bei der Entwicklung von Materialmodellen sind diese Vorgänge der Phänomenologie entsprechend zu erfassen und zu beschreiben. Am Beispiel Beton werden im Folgenden die Eigenschaften der einzelnen Skalen - ausgehend von der kleinsten Skala - vorgestellt.

Nano-/ Mikroskala

Auf der Mikro- bzw. Nanoskala ist es möglich, die Prozesse in der Porenstruktur einschließlich der Zementsteinphasen des Betons zu untersuchen. Hochauflösende Diagnostik ermöglicht den Zugriff auf reale Geometrien. Je nachdem welche Daten benötigt werden, kommen z.B. Computertomographen oder Mikroskope zur Anwendung. Die im Detail aufgelöste Porenstruktur erlaubt eine Berechnung der Porenströmung mit der Lattice Boltzmann Methode (LBM). Die Abbildung 1.1 zeigt beispielhaft die Aufnahme von Calcium-Silikat-Hydrat (C-S-H)-Phasen mit einem Environmental Scanning Electron Microscope (ESEM), welches eine detaillierte Darstellung der Struktur bis in den Nanometerbereich ermöglicht.

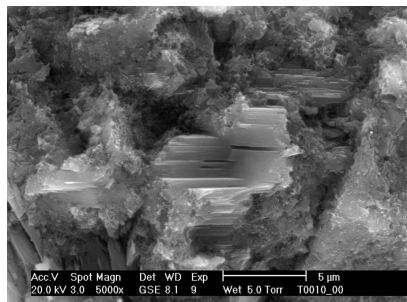


Abb. 1.1: ESEM-Aufnahme von CSH-Phasen aus [64]

Mesoskala

Der Beton kann auf der Mesoebene als 4-Phasen System bestehend aus Zementstein, ITZ (*Interfacial Transition Zone*), Zuschlag und Makroporen betrachtet werden, vgl. Abbildung 1.2. Auf dieser Ebene ist eine genaue Betrachtung des Betongefüges möglich. Die Auswirkungen einer Schädigung im Gefüge können direkt untersucht werden. Eine exakte Beschreibung des Porenraums kann hier nicht erfolgen. Daher muss eine verschmierte Porenstruktur angenommen werden. Durch die Modellierung der Gesteinskörnung ist die Lage der Poren jedoch räumlich eingegrenzt. Die Poren befinden sich nur im Zementstein und dieser besteht aus den feinen Anteilen der Gesteinskörnung, dem Zement und eventuellen Zuschlagsstoffen.

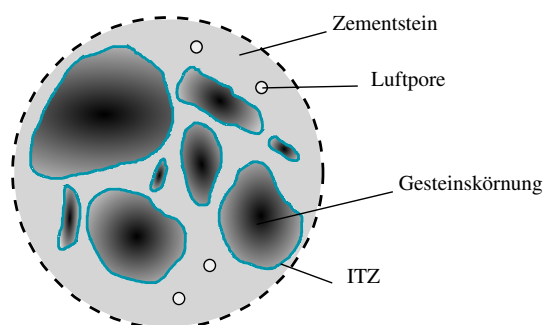


Abb. 1.2: Mesoebene

Makroskala

Auf der Makroskala werden sehr häufig Kontinuumsmodelle verwendet, die mit konstitutiven Gleichungen das Material- bzw. Tragwerksverhalten abbilden können. Die Beschreibung der Zusammenhänge erfolgt mit phänomenologischen Modellen. Weit verbreitet ist hierbei die Theorie poröser Medien, die einen ganzheitlichen Ansatz ermöglicht, wie z. B. in den Arbeiten von STEFFENS [52], TACKE [53], OSTERMANN [42] und CRAMER [16]. Auf der Basis eines repräsentativen Volumenelements (RVE) werden konstitutive Gleichungen für die Beschreibung der einzelnen Phasen ermittelt, siehe Abbildung 1.3. Die Bestandteile des Betons werden auf der Makroebene der festen, flüssigen oder gasförmigen Phase zugeordnet. Die Eigenschaften der Mikrostruktur werden mit Homogenisierungsmethoden in die Makroebene überführt.

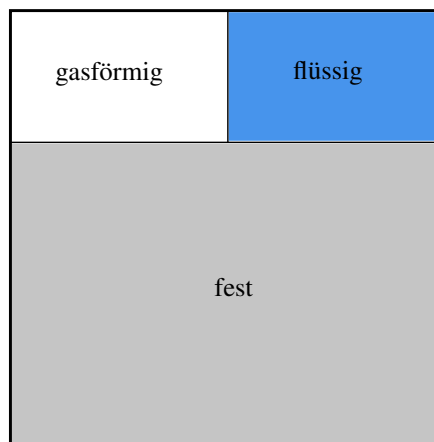


Abb. 1.3: Phasenaufteilung poröser Medien

1.2 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines chemisch-thermisch-mechanisch gekoppelten Modells für Beton auf der Mesoebene, welches die dort ablaufenden Prozesse beschreiben kann. Im Gegensatz zu makroskopisch phänomenologisch motivierten Modellen soll das heterogene Gefüge des Betons diskret modelliert werden. Die Gesteinskörner werden anhand von Sieblinien mit idealisierten sphärischen Partikeln im Rahmen der DEM modelliert. Das makroskopische mechanische Verhalten der dreidimensionalen Packung wird unter Variation der mikroskopischen Modellparameter untersucht und bewertet. Bruchphänomene können im Rahmen virtueller Experimente beobachtet werden.

Mit Berücksichtigung der Energiebilanz können thermisch-mechanisch gekoppelte Prozesse analysiert werden. Die Wirkung extremer Temperaturen infolge eines Brandes auf die Mesostruktur werden mit dem Wärmetransport erfasst.

Schädigende Substanzen dringen über die Poren in die Gefügestruktur ein. Die geometrische Abbildung der Poren und die Beschreibung der Transportprozesse im Porensy-

stem sind zwei wesentliche Aspekte. Im Zementstein finden zudem chemische Reaktionen statt, die eine zerstörende Wirkung entfalten können. Mit einer radikalen VORONOI-Tessellation wird die Topologie des Porenraumes beschrieben und gleichzeitig die geometrische Verknüpfung vom Festkörpergerüst und Poren-Netzwerk realisiert. Chemische Reaktionen können sowohl an einzelnen Partikeln als auch in einer virtuellen, aber räumlich definierten Prozesszone auftreten. Das Modell wird anhand analytischer und experimenteller Lösungen validiert.

Das Zusammenwirken der Felder wird an ausgewählten Beispielen untersucht. Bei einem Brandereignis entstehen thermische Verzerrungen im Bauteil, die eine thermisch-mechanische Kopplung bewirken. Die Hydratation dient als Beispiel für die chemisch-thermische Kopplung, da sie Wärme frei setzt und gleichzeitig von der Temperatur abhängig ist. Die Schädigung des Zementsteins infolge eines Sulfatangriffs auf den Beton verdeutlicht die chemisch-thermisch-mechanische Kopplung.

2 Einführung in die diskrete Elemente Methode

Die diskrete Elemente Methode (DEM) zählt zu den Partikelmethode und wurde von CUNDALL und STRACK [18] für die Beschreibung granularer Medien entwickelt. Zu den Partikelmethode zählen auch die SPH (Smooth-Particle-Hydrodynamics), die überwiegend für Fluidsimulationen verwendet wird [37] und die MD (Molecular-Dynamics), die für die Simulation von Molekülen genutzt wird.

In der DEM werden die materiellen Bestandteile eines Mediums mit Partikeln abgebildet, die miteinander interagieren können. Die Interaktion wird über die Implementierung von Kontaktbedingungen gesteuert. In den vergangenen Jahren wurden verschiedene Berechnungsmodelle für unterschiedliche Anwendungen entwickelt. Die Themengebiete reichen dabei von der Verfahrens- bzw. Prozesssimulation bis hin zu der Berechnung von Festkörpern, siehe z. B. [44] oder [33]. Im Gegensatz zu den klassischen Diskretisierungsmethoden der Kontinuumsmechanik, dies sind die Finite Elemente Methoden (FEM), erlaubt die DEM auch die diskrete Abbildung von Diskontinua.

Das Modell der vorliegenden Arbeit verwendet die ursprüngliche Fassung [18], die von OCKEL-MANN [40] auf den dreidimensionalen Fall erweitert wurde. Es kann sowohl für die Erzeugung von granularen Packungen als auch zur Beschreibung von Festkörpern verwendet werden. Der Unterschied liegt in der Art der Kontakte. In einer granularen Packung werden ausschließlich Kollisionskontakte berechnet, die je nach geometrischer Lage der Partikel entstehen und wieder verschwinden. Die Partikel in einem Festkörper werden fest miteinander verbunden und können über den Kontakt Zug- und Druckkräfte übertragen. Mit einem geeigneten Bruchmodell können auch Festkörperkontakte gelöst werden, was anschaulich einem Riss entspricht. Beide Anwendungsformen werden im Rahmen dieser Arbeit verwendet.

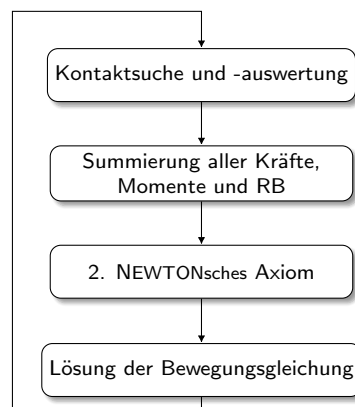


Abb. 2.1: Allgemeiner Ablauf einer DEM-Simulation

Den generellen Ablauf einer DEM-Simulation zeigt Abbildung 2.1. In jedem Berechnungsschritt müssen alle Kontakte gefunden und ausgewertet werden. Die Kontaktsuche

ist sehr rechenintensiv und kann z. B. mit der Aufteilung des Berechnungsgebietes in einzelne Zellen optimiert werden. Die Partikelbewegungen werden unter Berücksichtigung aller Kräfte, Momente und Randbedingungen (RB) mit dem 2. NEWTONschen Axiom beschrieben. Am Ende eines Zeitschritts muss die Bewegungsgleichung für jedes Partikel gelöst werden, wobei die zeitliche Integration mit einem zentralen Differenzenverfahren erfolgt. Im folgenden Abschnitt werden die Grundlagen des Modells vorgestellt.

2.1 Kontaktsuche und Auswertung

Ein einzelnes diskretes Element wird mit einem starren, perfekt runden Partikel abgebildet. Vorteilhaft ist hierbei der verhältnismäßig einfach zu implementierende Kontakt-suchalgorithmus. Treten zwei Partikel i und j miteinander in Kontakt, werden zwischen den beiden Partikeln Kräfte übertragen. Zur quantitativen Beschreibung der Kräfte werden Kontaktbedingungen benötigt, die über rheologische Modelle abgebildet werden. Feder-Dämpfer-Systeme in normaler und tangentialer Richtung werden dem Modell nach CUNDALL und STRACK entsprechend gewählt, siehe Abbildung 2.2. Das erweiterte Modell von CUNDALL wird für die dynamische Erzeugung von Partikelpackungen verwendet.

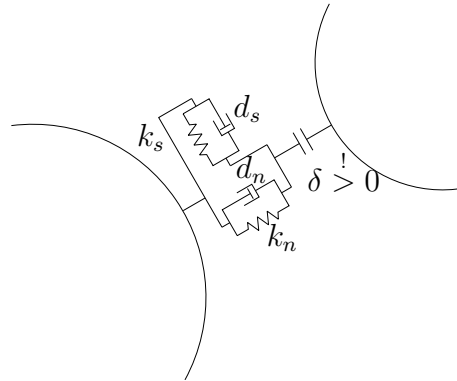


Abb. 2.2: Rheologisches Modell nach CUNDALL und STRACK

Die in Abbildung 2.3 dargestellte Konfiguration kennzeichnet den Moment, in dem zwei Partikel in Kontakt treten, hier vereinfacht in 2D dargestellt. Mit den Positionsvektoren \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j kann der räumliche Abstand zwischen den beiden Partikelzentren angegeben werden zu

$$l_c = ||\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i||. \quad (2.1)$$

Unter Berücksichtigung der Radien wird die Überlappung

$$\delta = r_i + r_j - l_c \quad (2.2)$$

berechnet. Folglich tritt eine Überlappung bei einem positiven δ auf. Unter der Annahme, dass die Überlappung klein ist im Verhältnis zur Gesamtverformung, können die Kontaktkräfte berechnet werden.

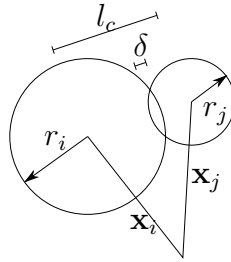


Abb. 2.3: 2D Kontaktkonfiguration

Im dreidimensionalen Fall wird eine Kontaktebene aufgespannt, mit dem Normalenvektor \mathbf{e}_n in Richtung des Verbindungsvektors und zwei senkrecht dazu stehenden Einheitsvektoren, die die Schubebene definieren. Die Steifigkeiten der Schubfedern k_s und k_t werden aus physikalischen Gründen identisch angenommen, da die Steifigkeit in einer Schubfläche richtungsunabhängig ist.

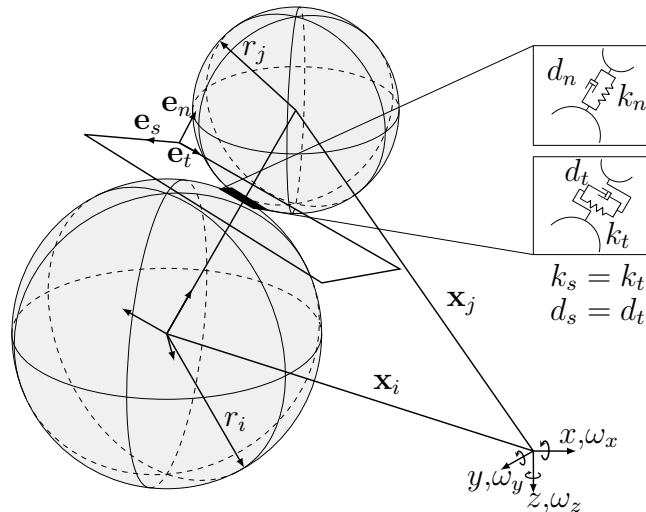


Abb. 2.4: 3D Kontaktkonfiguration

Die Relativgeschwindigkeiten der Partikel

$$\dot{\mathbf{x}}_{\text{rel}} = (\dot{\mathbf{x}}_i - \dot{\mathbf{x}}_j) + (\omega_i \times (\mathbf{e}_n r_i) - \omega_j \times (-\mathbf{e}_n r_j)) \quad (2.3)$$

können mit der Rotationsmatrix

$$\mathbf{R}^{ij} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_n & \mathbf{e}_s & \mathbf{e}_t \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

in das lokale Koordinatensystem übertragen werden

$$\dot{\mathbf{x}}_{\text{rel,lo}} = \left(\mathbf{R}^{ij} \right)^T \dot{\mathbf{x}}_{\text{rel}} \quad (2.5)$$

und so für die Kontaktauswertung genutzt werden. Vereinfachend werden die Geschwindigkeiten in einem Zeitschritt Δt als konstant angenommen, sodass sie auf die Relativverschiebungen

$$\Delta \boldsymbol{\delta} = \dot{\mathbf{x}}_{\text{rel},\text{lo}} \Delta t. \quad (2.6)$$

führen. Mit den Federsteifigkeiten werden die Federkräfte zu

$$\Delta \mathbf{f}_k = \begin{bmatrix} -k_n \Delta \delta_n \\ -k_t \Delta \delta_t \\ -k_s \Delta \delta_s \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

bestimmt, die in diesem Fall inkrementell ausgewertet werden, um Bruchvorgänge abbilden zu können. Die Federkräfte zum Zeitpunkt t werden damit zu

$$\mathbf{f}_k^t = \mathbf{f}_k^{t-1} + \Delta \mathbf{f}_k \quad (2.8)$$

bestimmt. Die Dämpferkräfte werden mit den aktuellen Relativgeschwindigkeiten ausgewertet

$$\mathbf{f}_d^t = - \begin{bmatrix} d_n & & \\ & d_s & \\ & & d_t \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \dot{x}_{\text{rel},n} \\ \dot{x}_{\text{rel},s} \\ \dot{x}_{\text{rel},t} \end{bmatrix}. \quad (2.9)$$

Mit der Projektion der Kräfte in das lokale Koordinatensystem wird der Kontaktkraftvektor festgelegt

$$\mathbf{f}_c^t = \left(\mathbf{R}^{ij} \right)^T (\mathbf{f}_k^t + \mathbf{f}_d^t). \quad (2.10)$$

Zu jedem Zeitpunkt t kann das Partikel i mit beliebigen anderen Partikeln in Kontakt stehen. Des Weiteren können externe Kräfte aus Gravitation oder Randbedingungen auf das Partikel einwirken. Summiert folgt der Lastvektor damit zu

$$\mathbf{f}_i^t = \sum_c \mathbf{f}_{c,i}^t + \mathbf{f}_{g,i}^t + \mathbf{f}_{bc,i}^t. \quad (2.11)$$

Mit dem 2. NEWTONschen Axiom können die aktuellen Beschleunigungen der jeweiligen Partikel bestimmt werden

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{M}_i \ddot{\mathbf{x}}_i) = \mathbf{M}_i \ddot{\mathbf{x}}_i = \mathbf{f}_i^t. \quad (2.12)$$

Die Winkelbeschleunigungen werden äquivalent hierzu aus dem Drallerhaltungssatz und dem Momentenvektor \mathbf{m}_i^t

$$\boldsymbol{\Theta}_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \boldsymbol{\Theta}_i \boldsymbol{\omega}_i = \mathbf{m}_i^t \quad (2.13)$$

bestimmt. Der allgemeine Berechnungsablauf ist zusammenfassend in Abbildung 2.5 dargestellt. Jeder Berechnungsschritt beginnt mit der Auswertung aller Kontakte und führt am Ende eines jeden Zeitschritts auf die Lösung eines Anfangswertproblems.

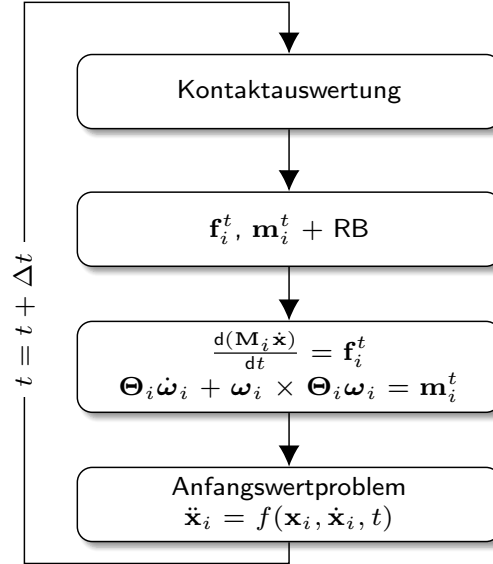


Abb. 2.5: DEM-Ablaufdiagramm

2.2 Zeitintegration

Die Auswertung der Bewegungsgleichung kann sowohl mit impliziten als auch mit expliziten Verfahren erfolgen. Die impliziten Verfahren nutzen Informationen des aktuellen Zeitschritts Δt_{n+1} und führen auf ein nichtlineares Gleichungssystem. Aufgrund der Vielzahl an auszuwertenden Gleichungen werden in der DEM häufig explizite Verfahren eingesetzt. Ein weit verbreitetes Verfahren ist das zentrale Differenzen Verfahren, das auch in der ursprünglichen Methode von CUNDALL Verwendung findet. Es gehört zu den Einzschrittsverfahren und wird auch in dieser Arbeit angewendet. Abgeleitet ist das Verfahren aus dem Verlet-Algorithmus [58], der eine effiziente und stabile Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichung ermöglicht.

Die aktuellen Beschleunigungen \ddot{x}^t der Partikel werden verwendet um die unbekannten Geschwindigkeiten \dot{x}^t sowie Positionen x^t der Partikel zu berechnen. Die Geschwindigkeiten werden bei diesem Verfahren jeweils zu den halben Zeitschritten berechnet und im Intervall Δt konstant angenommen. Damit werden die neuen Geschwindigkeiten zum Zeitpunkt $t + 0,5\Delta t$

$$\dot{x}^{t+0,5} = \dot{x}^{t-0,5} + \ddot{x}^t \Delta t \quad (2.14)$$

und die neuen Partikelpositionen zum Zeitpunkt $t + \Delta t$

$$x^{t+1} = x^t + \dot{x}^{t+0,5} \Delta t \quad (2.15)$$

bestimmt. Neben der relativ einfachen Implementierung des Verfahrens bietet die Auswertung der Geschwindigkeiten in der Hälfte eines Zeitintervalls den Vorteil, dass die physikalischen Größen des Systems wie Impuls und Drehimpuls erhalten bleiben [57].

2.3 Zeitschrittweite

Für die Lösung im Zeitbereich ist die Bestimmung der Zeitschrittweite essentiell. Die während der Berechnung im Modell auftretenden Frequenzen müssen erfasst werden können, um die Stabilität des numerischen Verfahrens zu gewährleisten. Für zwei miteinander in Kontakt stehende Partikel ist die Frequenz mit der Kontaktsteifigkeit und der Masse der Partikel bestimmbar. Die Eigenkreisfrequenz für ein ungedämpftes System ist gegeben mit

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.16)$$

Die größte Eigenkreisfrequenz tritt folglich beim Kontakt des leichtesten/kleinsten Partikels mit der größten Steifigkeit auf. Die kritische Zeitschrittweite kann mit der Periodendauer $T = 2\pi/\omega_{\max}$ zu

$$\Delta t_{\text{krit}} = \frac{T}{\pi} = \frac{2}{\omega_{\max}} \quad (2.17)$$

bestimmt werden. Die Erfassung von Dämpfungseffekten kann nach [27, 54] mit einem Faktor α berücksichtigt werden, der in den meisten Fällen zu $\alpha = 0,1$ abgeschätzt werden kann. In einem System mit festen Kontakten ist die maximale Frequenz und damit auch der kritische Zeitschritt direkt bestimmbar

$$\Delta t_{\text{krit}} = \alpha \cdot \sqrt{\frac{m_{\min}}{k_{\max}}} \quad (2.18)$$

2.4 Dämpfungsverhalten

Wie in der Abbildung 2.4 dargestellt, ist an jedem Kontakt zusätzlich zur Feder ein Dämpfungselement angeordnet. Das Dämpfungselement sorgt für die Energiedissipation, die in der Realität bei der Kollision zweier Massen entsteht. Die Dämpfungskonstante d wird wie bei OCKELMANN [40] vereinfachend über das LEHRsche Dämpfungsmaß α_d des Ein-Masse-Schwingers definiert, sodass

$$d = \alpha_d \cdot 2 \cdot \sqrt{mk} \quad (2.19)$$

Die Auswertung der Gleichung erfolgt für die Steifigkeiten k in Normalen- und Scher- richtung. Wird für m die kleinere der beiden in Kontakt stehenden Massen eingesetzt, können gezielt die höheren Frequenzen gedämpft werden.

2.5 Kontaktsuche

Für die Kontaktauswertung muss zwischen den verschiedenen Kontaktarten unterschieden werden. In dieser Arbeit werden sowohl Festkörperkontakte als auch Kollisionskon- takte verwendet. Die Festkörperkontakte sind bereits zu Beginn einer Berechnung bekannt und müssen daher ausschließlich ausgewertet werden. Bei der dynamischen Erzeugung von Partikelpackungen, vgl. Kapitel 3, können sich die einzelnen Partikel frei im Raum bewegen und mit anderen Partikeln kollidieren. Ohne einen effizienten Algorithmus steigt der Aufwand für die Kontaktsuche mit zunehmender Anzahl n an Partikeln quadratisch an $\mathcal{O}(n^2)$. Im Hinblick auf eine angemessene Berechnungszeit wurde ein Linked-cell Al- gorithmus implementiert.

2.5.1 Linked-cell Algorithmus

Das Berechnungsgebiet wird hierfür in gleich große Zellen eingeteilt, wobei die Größe einer einzelnen Zelle mindestens dem zweifachen Radius entsprechen muss. Die Partikel werden anhand der geometrischen Position genau einer Zelle zugeteilt. Das rote Partikel in Abbildung 2.6 bestimmt die Größe der Zellen. Die Interaktion der einzelnen Partikel beschränkt sich auf die jeweilige Zelle und deren Nachbarzellen. Das rote Partikel muss auf eine mögliche Kollision mit dem blauen Partikel geprüft werden. Eine mögliche Kol- lision mit dem grünen Partikel wird durch das Suchgitter ausgeschlossen. Der Aufwand der Kontaktsuche reduziert sich auf $\mathcal{O}(n \log n)$.

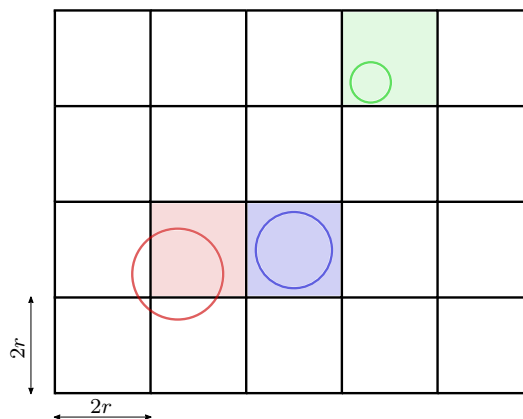


Abb. 2.6: Schema der Kontaktsuche mit verknüpften Zellen

2.5.2 Cross-level-search

Der im vorherigen Kapitel beschriebene Linked-cell Algorithmus ist sehr gut geeignet um monodisperse Partikelpakete zu berechnen. Die Zellengröße kann optimal an den Radius angepasst werden. Wird ein bidisperses System aus Partikeln betrachtet, muss in die kleinste Zelle des Gitters das größte Partikel passen. Bei großer Partikelgrößen-Verteilung passen sehr viele Partikel mit kleinem Radius in die großen Zellen. Daraus ergeben sich viele mögliche Kollisionen, deren Auswertung sich negativ auf die Berechnungszeit auswirkt. Für eine Verbesserung der Berechnungszeit wird das von [41] vorgeschlagene „hierarchical grid“ Modell implementiert. Auf dem zu berechnenden Gebiet werden mehrere Gitter in unterschiedliche Größe erzeugt. Diese richten sich nach den vorhandenen Partikelgrößen. Die Partikel werden entsprechend ihrer Größe auf ein vorhandenes Gitter einsortiert. Innerhalb eines Gitters erfolgt die Kontaktsuche mit dem „klassischen“ linked-cell-Algorithmus. Zusätzlich wird eine Kontaktsuche zwischen den einzelnen Gittern durchgeführt. In einem definierten Bereich um ein Partikel wird auf den unteren Gitterebenen nach möglichen Kollisionen gesucht. Ausgehend von der Position eines Partikels \mathbf{x}_p werden zwei Punkte \mathbf{x}_c^\pm in einem definierten Abstand erzeugt, deren Verbindung die Diagonale einer Suchbox darstellt

$$\mathbf{x}_c^\pm = \mathbf{x}_p \pm (r_p + 0,5 \cdot s_h) \cdot \sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_i. \quad (2.20)$$

Dabei bezeichnet s_h den Suchgitterabstand, r_p den Radius des Partikels und \mathbf{e}_i ist der Einheitsvektor bezogen auf das globale Koordinatensystem.

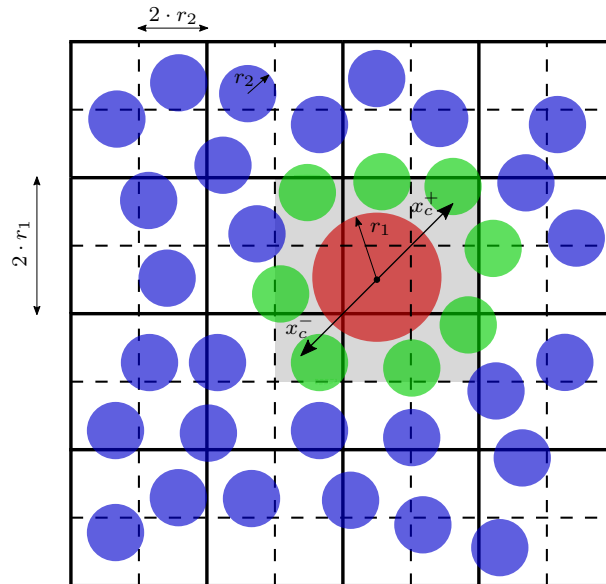


Abb. 2.7: Hierarchische Kontaktsuche nach [41]

Die so definierten Punkte dienen für die Identifikation von Boxen auf kleineren Such-

gittern. Dieser „cross-level-search“ wird immer von oben nach unten durchgeführt und ist als grauer Bereich in der Abbildung 2.7 gekennzeichnet. Die doppelte Auffindung eines Kontaktes wird damit vermieden. Das rote Partikel aus dem oberen Gitter kann nur mit den grün eingefärbten Partikeln des kleineren Gitters in möglichen Kontakt treten. Die blauen Partikel müssen nicht auf mögliche Kollision mit dem roten Partikel getestet werden. Dieser Algorithmus hat die Ordnung $\mathcal{O}(N)$.

2.6 Spannungsberechnung

Alle auf ein Partikel einwirkenden Kräfte erzeugen einen Spannungszustand im Partikel. Zusätzlich zu den lokalen Spannungen können auch durchschnittliche Spannungen in einem Kontrollvolumen ermittelt werden. Das Kontrollvolumen kann sowohl Teilen des betrachteten Körpers als auch dem gesamten Körper entsprechen. Die Auswertung erfolgt nach [13] mit der Summe über alle Kontakte N_c im Kontrollvolumen

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V_{\text{RVE}}} \sum_{c=1}^{N_c} \mathbf{L}^c \otimes \mathbf{F}^c. \quad (2.21)$$

Der Abstandsvektor \mathbf{L}_c beschreibt hierbei den Abstand zwischen zwei Kontakten

$$\mathbf{L}_c = \mathbf{x}_p^i - \mathbf{x}_p^j. \quad (2.22)$$

Im Lastvektor \mathbf{F}_c sind die lokalen Kraftkomponenten im globalen Koordinatensystem zusammengefasst.

2.7 Randbedingungen

Im Programmablauf können sowohl Weg- als auch Krastrandbedingungen berücksichtigt werden. Krastrandbedingungen werden vor der Anwendung des Impulssatzes direkt im Lastvektor (2.11) berücksichtigt.

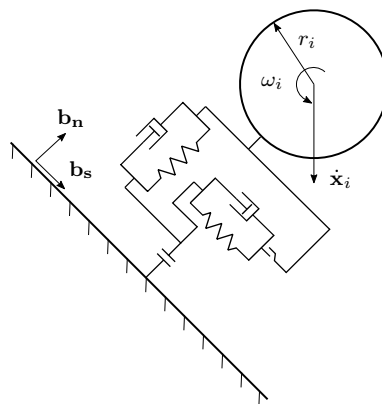


Abb. 2.8: Kontaktkonfiguration Wand-Partikel

Die Wegrandbedingungen werden vor der Aktualisierung der zugehörigen Beschreibungsvariable direkt gesetzt. Eine weitere Möglichkeit ist die Modellierung indirekter Randbedingungen in Form von starren Objekten. In Analogie zur Formulierung einer starren Wand von CUNDALL [18] ist das rheologische Modell für einen Kollisionskontakt zwischen einem Partikel und einer starren Wand in Abbildung 2.8 dargestellt.

Die Geschwindigkeiten der Partikel werden auf das lokale Koordinatensystem b der Wand projiziert. Die Steifigkeiten der Wandfedern müssen hoch (vgl. Abschnitt 4.3.1) gewählt werden, um eine starre Wand zu bilden. Die Auswertung des Kontaktes erfolgt analog zu Gleichung (2.6).

2.8 Definition von Festkörperkontakten

Die in Abschnitt 2.5 gewählte Kontaktdefinition kann auch für den Festkörperkontakt verwendet werden. Der Kontakt wird dafür vor dem Start der Berechnung als Festkörperkontakt initialisiert und bleibt bis zum Ende der Berechnung bestehen, es sei denn eine Bruchbedingung bewirkt die vorzeitige Auflösung des Kontakts. Im Laufe einer Berechnung können Relativverschiebungen zwischen zwei Partikeln mit einem Festkörperkontakt auftreten. Das lokale Kontaktkoordinatensystem erfährt durch die Translation eine Drehung, sodass eine Aktualisierung in jedem Zeitschritt erforderlich ist. Die neue Richtung wird aus den Partikelpositionen bestimmt. Die Drehung aus der alten in die neue Position wird effizient mit Hilfe von Quaternionen umgesetzt. Das genaue Vorgehen ist detailliert von OCKELMANN [40] beschrieben.

Als Alternative zur rein geometrischen Kontaktdefinition wird an dieser Stelle die VORONOI-Tessellation [60] als eine weitere Möglichkeit zur Definition von Festkörperkontakten gezeigt. Mit einer radikalen VORONOI-Tessellation wird das Berechnungsgebiet in einzelne Zellen zerschnitten, wobei die Radien der Partikel als Wichtungsfaktoren genutzt werden.

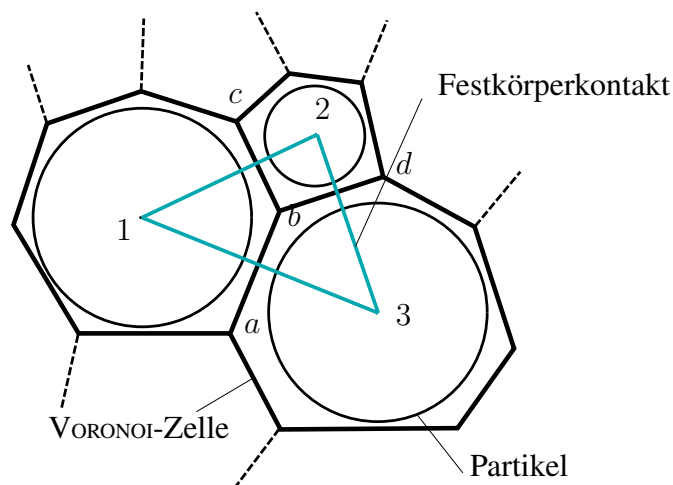


Abb. 2.9: Zweidimensionales VORONOI-Diagramm mit Definition von Festkörperkontakten

Nach Abschluss der Tesselation ist jedes Partikel von einer Zelle umgeben. Eine gemeinsame Kontaktfläche zwischen zwei Zellen ist Bedingung für die Erstellung eines Festkörperkontaktes. In Abbildung 2.9 ist das Vorgehen an einem zweidimensionalen Beispiel gezeigt. Partikel 1 hat eine gemeinsame Kante $a-b$ mit Partikel 3, sodass ein Festkörperkontakt generiert werden kann. Analog wird mit den weiteren Partikeln verfahren. Im dreidimensionalen werden Kontaktflächen anstelle der Kanten definiert. Die Erzeugung des VORONOI-Diagramms erfolgt im Rahmen dieser Arbeit mit der *Voro++*-Bibliothek [49].

Die vorgestellte Art der Kontaktdefinition ist gut für die Berechnung von Partikelpackungen geeignet, vgl. Abschnitt 3. Des Weiteren zeigen sich Vorteile bei der Kopplung unterschiedlicher Felder, vgl. Kapitel 5 und 6

2.9 Bruchbedingungen

Wie bereits in der Einführung erwähnt, können mit diskreten Elemente Methode auch Diskontinua abgebildet werden. Die festen Kontakte zur Beschreibung eines Festkörpers können mit Bruchbedingungen belegt werden um Risse abzubilden. Die Formulierung einer Bruchbedingung kann mit unterschiedlichen Ansätzen erfolgen. In vielen Arbeiten werden maximale Kräfte definiert, die vom Kontakt aufgenommen werden können. In dieser Arbeit wird das von OCKELMANN [40] entwickelte Bruchkriterium auf Basis lokaler Verzerrungen verwendet

$$1 \geq \begin{cases} \left(\frac{\alpha_{\varepsilon n} \varepsilon_{nn}^{ij}}{\varepsilon_{\max}} \right)^2 + \left(\frac{\varepsilon_{ns}^{ij}}{\varepsilon_{\max}} \right)^2 + \left(\frac{\varepsilon_{nt}^{ij}}{\varepsilon_{\max}} \right)^2 & , \text{ wenn } \varepsilon_{nn}^{ij} > 0 \\ \left(\frac{\varepsilon_{ns}^{ij}}{\varepsilon_{\max}} \right)^2 + \left(\frac{\varepsilon_{nt}^{ij}}{\varepsilon_{\max}} \right)^2 & , \text{ wenn } \varepsilon_{nn}^{ij} < 0 . \end{cases} \quad (2.23)$$

Das Versagenskriterium ist in einen Druck- und Zugbereich aufgeteilt und wird mit zwei Modellparametern beschrieben. Im Zugbereich kann die Versagensfläche mit $\alpha_{\varepsilon n}$ in der Größe angepasst werden, wobei größere Werte eine Verkleinerung bewirken. Mit dem Parameter ε_{\max} wird die maximal mögliche lokale Verzerrung definiert, die im diskreten Modell als die größtmögliche Entfernung von zwei Partikeln interpretiert werden kann. Im Druckbereich wird ausschließlich ein Schubversagen angenommen, im Zugbereich werden zusätzlich noch die lokalen Verzerrungen in Normalenrichtung berücksichtigt.

Der Parameter $\alpha_{\varepsilon n}$ dient zur Steuerung des makroskopischen Verhaltens einer Partikelpackung. Zur Abschätzung des Einflusses werden im Abschnitt 3.4 mehrere Simulationen unter Variation des Parameters durchgeführt.

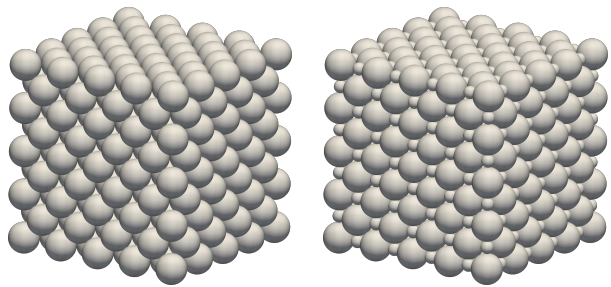
3 Packungen

Je nach Anwendungsfall ist vor dem Start einer Berechnung eine geeignete Packung auszuwählen und zu erstellen. Prinzipiell kann die Aufgabe in die Erstellung von symmetrischen, gleichförmigen Packungen und zufälligen, ungleichförmigen Packungen unterteilt werden. Die Eigenschaften der Packung bestimmen maßgeblich das makroskopische Verhalten und müssen mit Bedacht gewählt werden. Im Folgenden werden sowohl gleichförmige als auch zufällige dichte Packungen vorgestellt. Eine Bewertung und Charakterisierung der verschiedenen Packungen wird in Abschnitt 3.3 vorgenommen.

3.1 Gleichförmige Packungen

Gleichförmige Packungen sind geometrisch klar definiert und können daher schnell und effizient programmiert werden. Die Bezeichnung einer Packung aus Partikeln gleicher Größe richtet sich nach der Lage und der Orientierung der einzelnen Partikelschichten. Die dichteste Packungslage wird mit der hexagonal-dichten und der kubisch-flächenzentrierten Lage erreicht. Die maximal mögliche Packungsdichte liegt bei $\eta = \pi/3\sqrt{2} \approx 0,74$. OCKELMANN [40] benutzt eine symmetrische Einheitszelle aus der kubisch-flächenzentrierten Lage um das Kontinuum zu beschreiben. Diese Vorgehensweise erlaubt die analytische Bestimmung der benötigten Materialparameter in Abhängigkeit der makroskopischen Kenngrößen E-Modul und Querdehnzahl. Eine Übersicht der lokalen Steifigkeitsparameter ist in der Tabelle 3.1 dargestellt. Die linke und rechte Spalte zeigen eine kubisch-flächenzentrierte Anordnung der Partikel, die in der rechten Spalte mit Partikeln in den Oktaederlücken ergänzt sind. Mit diesen Packungen werden Validierungen und Vergleiche durchgeführt.

Tabelle 3.1: Materialparameter für symmetrische Einheitszellen

	
$k_n = \frac{\sqrt{2}Er}{2(1-2\nu)}$	$k_n = \frac{\sqrt{2}Er}{3(1-2\nu)}$
$k_s = k_t = \frac{\sqrt{2}Er(1-3\nu)}{2(1-2\nu^2-\nu)}$	$k_s = k_t = \frac{\sqrt{2}Er(1-5\nu)}{3(1-2\nu^2-\nu)}$
	$k_{okt} = \frac{\sqrt{2}Er}{3(1+\nu)}$

3.2 Zufällige Packungen

Die innere Struktur von Beton ist stark heterogen und wird maßgeblich durch die Wahl der Gesteinskörnung bestimmt. Im Folgenden wird der Beton, mit dem Ziel einer realitätsnahen Gefügearrangung, mit Partikeln unterschiedlicher Größe beschrieben. Die resultierenden Packungen sind rein zufällig und eine analytische Bestimmung der Materialparameter ist nicht mehr möglich. Die Auswahl der Gesteinskörnung erfolgt anhand von Sieblinien nach DIN 1045-2 und wird auf den jeweiligen Anwendungsfall abgestimmt. Mit einer abgestuften Sieblinie kann eine optimal dichte Packung hergestellt werden, die dauerhaft und gut für die Kraftübertragung geeignet ist. Anhand verschiedener Aspekte wird in diesem Kapitel auf die numerische Simulation dieses Gefüges eingegangen. Welche Auswirkungen haben mikroskopische Parameter auf die makroskopischen Eigenschaften oder wie können unterschiedliche Packungen miteinander verglichen werden sind grundlegende Fragestellungen für die Modellbildung.

3.2.1 Sieblinien

Die Idealsieblinie lässt sich nach FULLER und THOMPSON mit

$$A = 100 \cdot \left(\frac{d_a}{D_a} \right)^n \quad (3.1)$$

beschreiben. Das Ergebnis A der FULLER-Parabel ist der Siebdurchgang in Prozent bei einer gegebenen Sieblochweite d_a und der maximalen Korngröße D_a . Mit der Wahl des Exponenten n kann die Packungsdichte variiert werden. Für $n = 0,5$ wird eine optimal abgestufte Sieblinie hinsichtlich der Packungsdichte erzeugt. Mit den Sieblinien nach DIN 1045-2 kann nur im groben Kornbereich eine Übereinstimmung festgestellt werden.

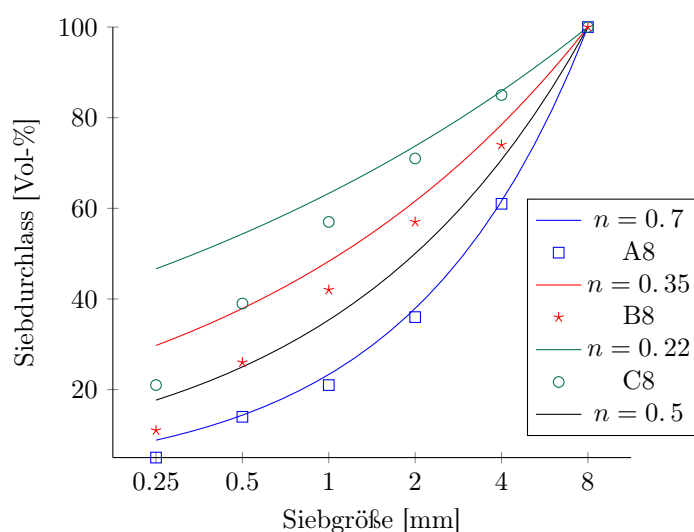


Abb. 3.1: Vergleich der FULLER-Parabel mit Sieblinien nach DIN 1045-2

Der Feinkornbereich der FULLER-Parabel ist deutlich höher. Ein Vergleich von drei Sieblinien nach DIN 1045-2 mit gewählten Exponenten n der FULLER-Parabel ist in der Abbildung 3.1 dargestellt. Die beste Näherung wird für die A8-Sieblinie erreicht. Im Vergleich dazu kann die gleichmäßig abgestufte Sieblinie C8 nur unzureichend nachgebildet werden. Für die Erstellung von verschiedenen Packungen werden in dieser Arbeit die Sieblinien nach DIN 1045-2 verwendet.

Bei der Berechnung einer Betonmischung gilt es verschiedene Parameter festzulegen. Die Betone unterscheiden sich unter Anderem hinsichtlich des Zuschlags, des Zementgehalts, dem Wasser-Zement-Wert und dem Anteil an Luftporen. Des Weiteren können noch Zusatzstoffe, wie z. B. Silicastaub oder Flugasche das Gefüge beeinflussen. Unter Vernachlässigung der Zusatzstoffe folgt der benötigte Volumenanteil des Zuschlags mit

$$v_a = 1 - \frac{c}{\rho_c} - \frac{w}{\rho_w} - v_{Luft}. \quad (3.2)$$

Darin ist c der Zementgehalt, ρ_c die zugehörige Dichte des verwendeten Zements, w der Wasser-Zement-Wert, ρ_w die Dichte von Wasser und v_{Luft} das Volumen der Luftporen.

Das Zuschlagsvolumen setzt sich aus den Teilvolumina der Kornfraktionen zusammen. Innerhalb einer Kornfraktion werden sukzessive Radien mit Hilfe eines Zufallsgenerators berechnet. Die Radien werden hierbei in einer Kornfraktion als gleichverteilt angenommen. Im Programm werden Partikelgeneratoren benutzt, welche die vordefinierten Radien zur Erzeugung von Partikeln nutzen. In Abbildung 3.2a ist eine Momentaufnahme aus dem Erstellungsprozess eines Probekörpers dargestellt. In der oberen Ebene werden die Partikel mit Hilfe der Partikelgeneratoren erzeugt und fallen dann aufgrund von Gravitationskräften in den vordefinierten Behälter. Der Kontaktsuchalgorithmus nach Abschnitt 2.5 wird für die Berechnung der Kollisionen verwendet. Ist das Behältnis gefüllt, werden die überschüssigen Partikel abgeschoben und ein Verschluss aufgesetzt, vgl. Abbildung 3.2b. Die so erstellten Packungen können für weitere Berechnung aufbereitet werden.

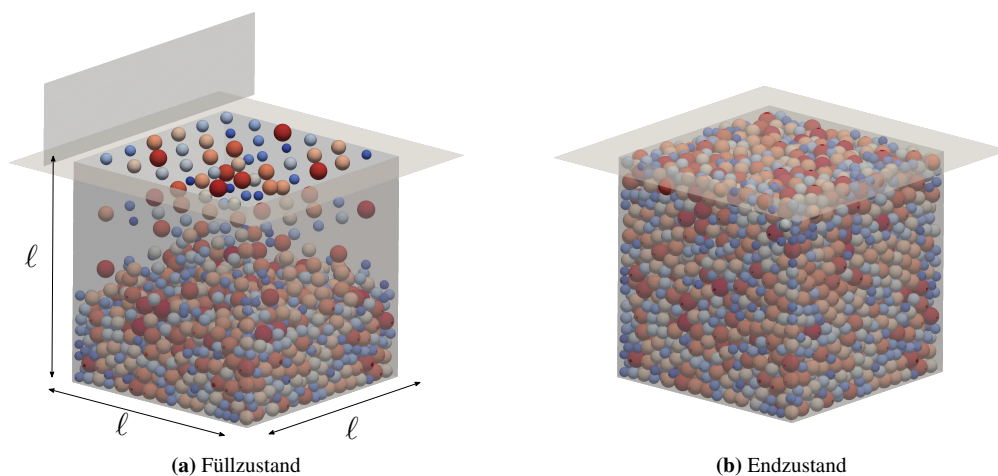


Abb. 3.2: Erstellen eines Probekörpers

Eine weitere, oft angewendete Methode zur Erstellung von polydispersen Packungen im Kontext der DEM wird von KANSAL [29] beschrieben. Dafür werden zunächst Partikel frei im Berechnungsgebiet ohne Überlappung positioniert. Im nächsten Schritt folgt die sukzessive Anpassung der jeweiligen Partikelradien, bis zur gewünschten Packungsdichte oder Verteilung. Das in dieser Arbeit verwendete Verfahren ist einfacher zu implementieren, weist im Vergleich der Berechnungszeiten aber eine negative Bilanz auf.

Aus der anfänglichen granularen Packung werden unter Verwendung des Kontaktmodells nach Abbildung 2.2 initial verbundene Kontakte mit definierter Steifigkeit erzeugt und somit ein Festkörper erstellt. Auf die Bestimmung der Parameter wird in Abschnitt 3.4 eingegangen.

Um eine vollständige Sieblinie mit Partikeln in realer Größe zu beschreiben, sind je nach Abmessungen des Probekörpers Partikelzahlen im zweistelligen Millionenbereich notwendig. Der numerische Aufwand ist enorm und ohne leistungsfähige Rechner und stark optimierten Berechnungsprogrammen ist eine Berechnung nicht in angemessener Zeit realisierbar. Der Aufwand beim Einsatz anderer Diskretisierungsverfahren wie der Finiten Element Methode ist jedoch ungleich höher. In diesem Fall muss jedes Einzelne Partikel mit einem Netz aus hunderten Elementen abgebildet werden, was die Anzahl der Freiwerte nochmals stark erhöht.

In den nachfolgenden Diagrammen in Abbildung 3.3 ist die Anzahl der benötigten Partikel für verschiedene Würfelgrößen dargestellt. Die Sieblinien mit höherem Feinkornanteil 3.3e-3.3f benötigen deutlich mehr Partikel als die gröberen Sieblinien. Eine Auflösung der gesamten Struktur ist aufgrund der hohen Zahlen nicht durchführbar. Für die Entwicklung eines geeigneten Modells zur Beschreibung des heterogenen Gefüges des Betons müssen daher Vereinfachungen getroffen werden. Die Beschränkung auf einzelne Kornfraktionen reduziert den Berechnungsaufwand erheblich. Die Verwendung von Partikeln bis zu einem minimalen Durchmesser von $d_{\min} = 2 \text{ mm}$ wird an dieser Stelle als zweckmäßig erachtet. Die Eigenschaften des Zementsteins werden in den Kontaktbedingungen berücksichtigt. Für die Entwicklung der Methodik sind diese Vereinfachungen als geeignet anzusehen.

Die ITZ kann ohne die Verwendung von Gesteins- und Zementsteinpartikeln nicht explizit abgebildet werden und ist daher nicht Gegenstand der weiteren Betrachtung. NITKA [39] definiert drei Kontaktarten mit jeweils angepassten Steifigkeiten für Zement-Zement-, Gestein-Gestein- und Zement-Gestein-Kontakt. Der Kontakt zwischen Gestein und Zement wird mit der kleinsten Steifigkeit angesetzt und repräsentiert damit die ITZ. Aufgrund des hohen numerischen Aufwandes werden aber nur zweidimensionale Scheiben untersucht.

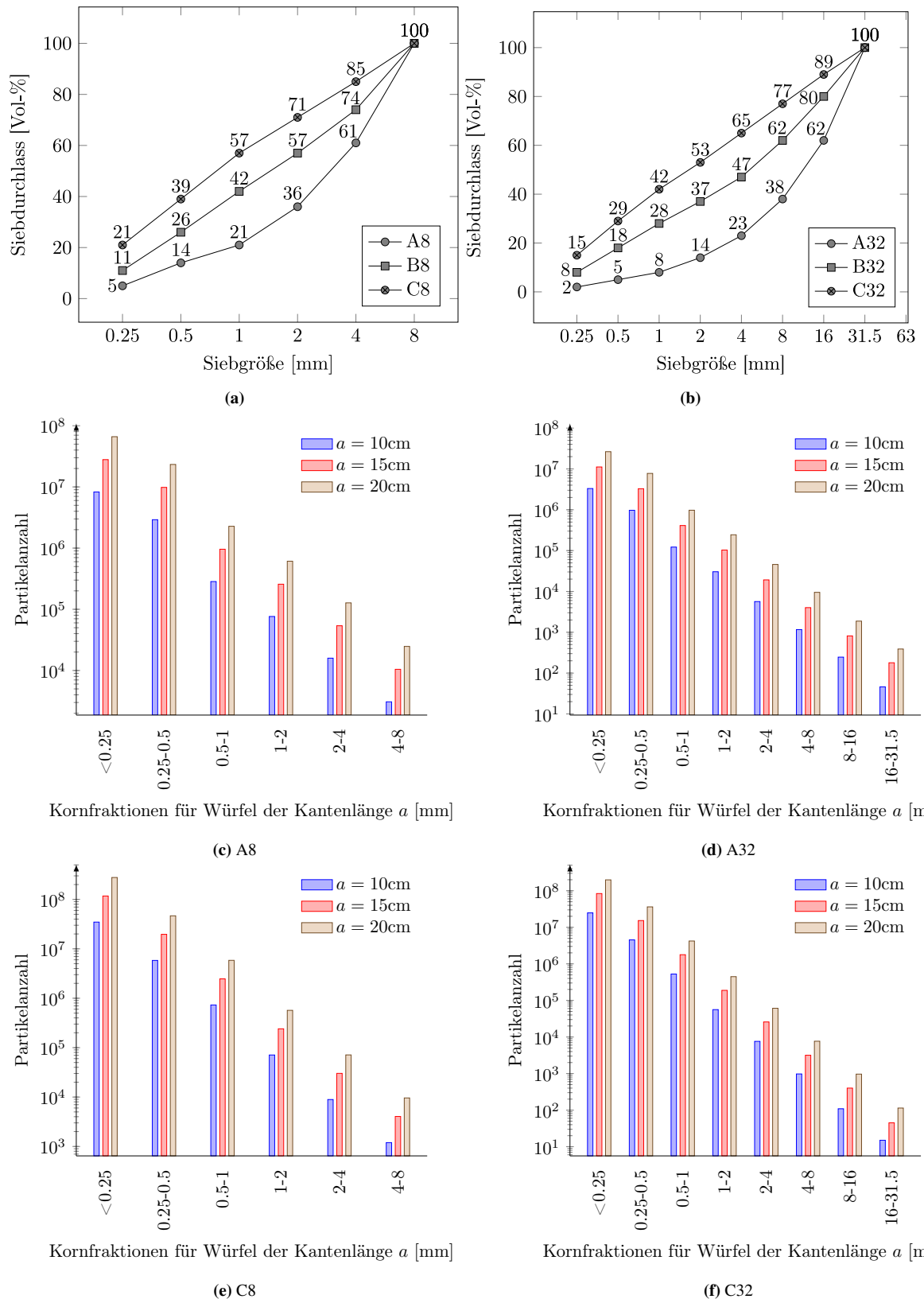


Abb. 3.3: Sieblinien nach DIN 1045-2 und Partikelanzahlen für Würfel unterschiedlicher Kantenlängen

3.3 Charakterisierung der Packungen

Die zufällige Erzeugung von Kugelpackungen erfordert eine Bewertung für die weitere Berechnung. Je nach Anwendungsfall können hierbei unterschiedliche Bewertungskriterien in Betracht gezogen werden, die eine Charakterisierung und damit auch eine Vergleichbarkeit der Packungen ermöglichen. Eine ausführliche Übersicht findet sich in [38]. Ausgewählte Kriterien werden hier im Folgenden kurz erläutert.

3.3.1 Isotropie

Der Beton zeigt makroskopisch ein isotropes Materialverhalten. Diese Anforderung wird auch an das numerische Modell gestellt. Mit dem „fabric tensor“ ϕ_{ij} wird die gleichmäßige Richtungsverteilung der Kontakte bewertet. Berechnet wird der Tensor 2. Ordnung mit

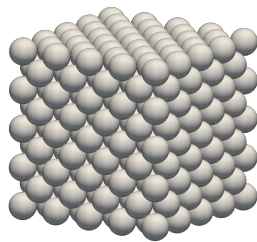
$$\phi_{ij} = \frac{\sum_{c=1}^N \mathbf{n}_i^c \mathbf{n}_j^c}{N}, \quad (3.3)$$

wobei \mathbf{n}^c den Einheitsvektor eines Kontaktes repräsentiert und $i, j \in \{1, 2, 3\}$. Die Summe der drei positiven Eigenwerte λ_i von ϕ ergibt 1. Für ein vollständig isotropes Material gilt $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1/3$. Nach [38] muss ein kleiner Fehler zugelassen werden. Eine Packung kann als isotrop angenommen werden, wenn bei einem relativen Fehler kleiner 5% gilt

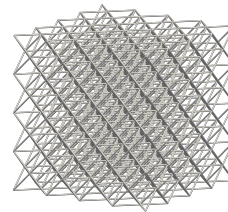
$$|\lambda_i - 1/3| / (1/3) < 5\%. \quad (3.4)$$

In Abbildung 3.4 ist ein Würfel mit einer regelmäßigen Konfiguration und dem dazugehörigen Kontaktnetzwerk dargestellt. Die Abweichungen der Eigenwerte betragen in diesem Fall

$$\varepsilon_1 = 2,56e-5, \quad \varepsilon_2 = 2,41e-5, \quad \varepsilon_3 = 2,41e-5.$$



(a) Partikel



(b) Kontaktnetzwerk

Abb. 3.4: Regelmäßige Anordnung

Regelmäßige symmetrische Anordnungen erfüllen die Anforderungen an die Isotropie. Werden jedoch Partikelpackungen rein zufällig erzeugt, ist eine vorherige Aussage über

die Isotropie nicht möglich und damit die Bestimmung des fabric tensors notwendig. Dafür ist eine Partikelpackung aus unterschiedlichen Korngrößen in Abbildung 3.5 dargestellt. Zu erkennen ist außerdem das sehr unregelmäßige Kontaktnetzwerk, das aber die Anforderungen an die Isotropie erfüllt. Die Abweichungen bewegen sich im vorher bestimmten Grenzbereich, sind allerdings deutlich größer als bei der regelmäßigen Anordnung.

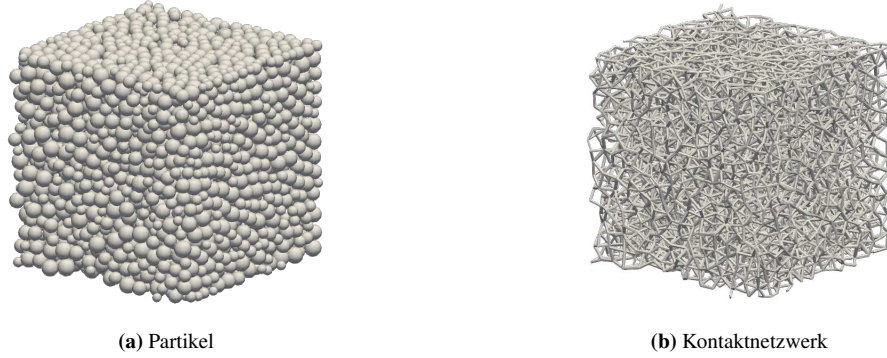


Abb. 3.5: Zufällige Anordnung

Für dieses konkrete Beispiel betragen die Abweichungen

$$\varepsilon_1 = 3,12\%, \quad \varepsilon_2 = 1,73\%, \quad \varepsilon_3 = 4,85\%.$$

Je höher die Packungsdichte gewählt wird, desto genauer werden die Isotropieeigenschaften des Würfels abgebildet.

3.3.2 Homogenität der Partikelpositionen

Ein weiteres Bewertungskriterium ist die Homogenität der Partikelpositionen. Es wird überprüft, ob die geometrischen Orte einzelner Partikel eine gleichmäßige Verteilung in den drei Raumrichtungen ergeben. Die geometrischen Orte werden hierzu auf das Intervall $[0,1)$ skaliert und mit Hilfe statistischer Verfahren mit Verteilungsfunktionen verglichen. In diesem Fall wird der Kolmogorov-Smirnov (KS) Test [50] verwendet. Dazu werden die minimalen bzw. maximalen Abweichungen zwischen der vorhandenen und der zu überprüfenden Verteilung verglichen und statistisch bewertet

$$D_n^+ = \max_{1 \leq i \leq n} \left[\frac{i}{n} - x_i \right], \quad D_n^- = \max_{1 \leq i \leq n} \left[x_i - \frac{i-1}{n} \right], \quad D_n = \max\{D_n^+, D_n^-\}. \quad (3.5)$$

Die Null-Hypothese, welche besagt, dass die vorliegenden Werte eine gleichmäßige Verteilung ergeben, wird verworfen, wenn

$$\left(\sqrt{n} + 0,12 + \frac{0,11}{\sqrt{n}} \right) D_n > c_{1-\alpha}. \quad (3.6)$$

Die Menge der zu prüfenden reellen Zahlen ist mit n bezeichnet. Der kritische Wert für ein Vertrauensintervall von 95% ($\alpha = 5\%$) beträgt 1,358.

Nachfolgend dargestellt sind die Histogramme der Partikelpositionen für unterschiedliche Packungen. Zu erkennen ist bei allen drei Packungen eine über den Querschnitt nahezu homogene Verteilung die zu den Rändern geringfügig ansteigt. Dort ist eine verstärkte Ansammlung von kleineren Partikeln zu finden.

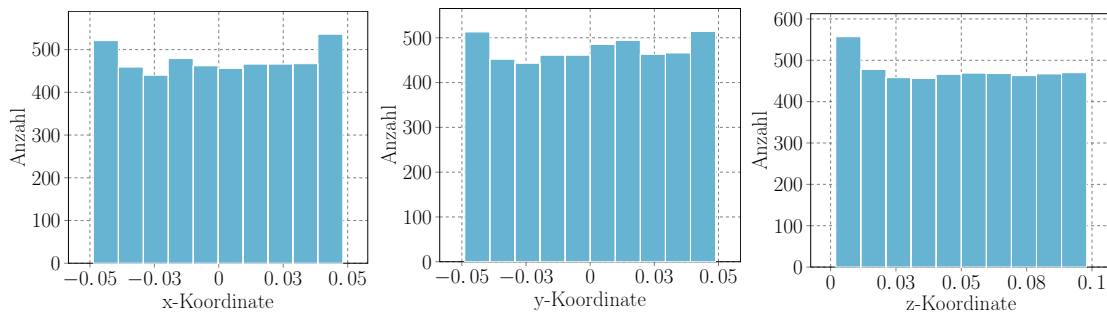


Abb. 3.6: Histogramme der Partikelpositionen in x,y,z-Richtung, Sieblinie A8, Körnung 4-8

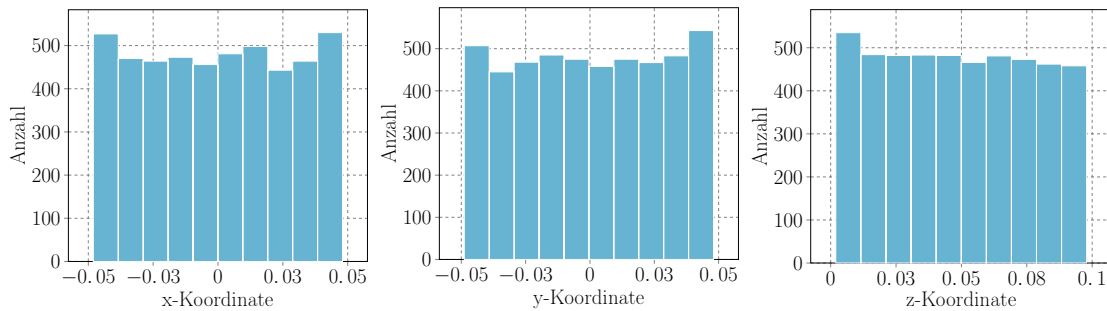


Abb. 3.7: Histogramme der Partikelpositionen in x,y,z-Richtung, Sieblinie B8, Körnung 4-8

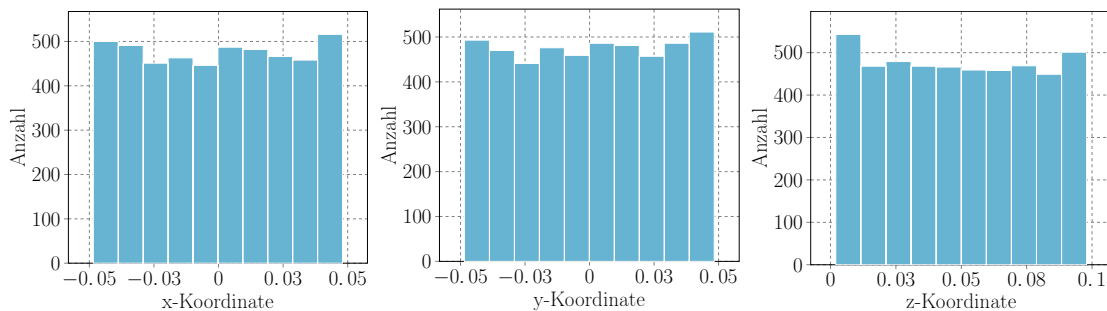


Abb. 3.8: Histogramme der Partikelpositionen in x,y,z-Richtung, Sieblinie C8, Körnung 4-8

3.3.3 Koordinationszahl

Die Koordinationszahl ist eine wichtige Packungseigenschaft. Sie beschreibt die Anzahl der Kontakte eines Partikels und ist gegeben mit

$$Z = 2 \cdot \frac{N_c}{N_p} \quad (3.7)$$

N_c ist die Summe aller Kontakte im System und N_p determiniert die Anzahl der Partikel. In einer Partikelpackung sind nicht alle Partikel gleichermaßen am Lastabtrag beteiligt. Dies kann berücksichtigt werden, in dem eine mechanische Koordinationszahl bestimmt wird

$$Z_m = 2 \cdot \frac{N_c - N_p^1}{N_p - (N_p^1 + N_p^0)} \quad (3.8)$$

Die Parameter N_p^0 und N_p^1 beschreiben die Anzahl der Partikel mit keinem bzw. einem Kontakt. Je größer die Koordinationszahl einer Packung, desto gleichmäßiger ist der Lastabtrag. OCKELMANN [40] beschreibt das Kontinuum unter Verwendung von symmetrischen Einheitszellen mit gefüllten Oktaederlücken. Ein Partikel kann in diesem Fall mit maximal 18 anderen Partikeln in Kontakt treten. Je nach Anzahl an Einheitszellen ändert sich die Koordinationszahl der erzeugten Packung. Der Zusammenhang ist in der nachfolgenden Abbildung 3.9 dargestellt. Die Koordinationszahl strebt bei zunehmender Verwendung von Einheitszellen gegen den Maximalwert. Das zugehörige Histogramm für die Anzahl an Kontakten ist in Abbildung 3.9-rechts für eine Packung mit 8 Einheitszellen dargestellt. Die ungleichmäßige Verteilung ist charakteristisch für eine regelmäßige Packung.

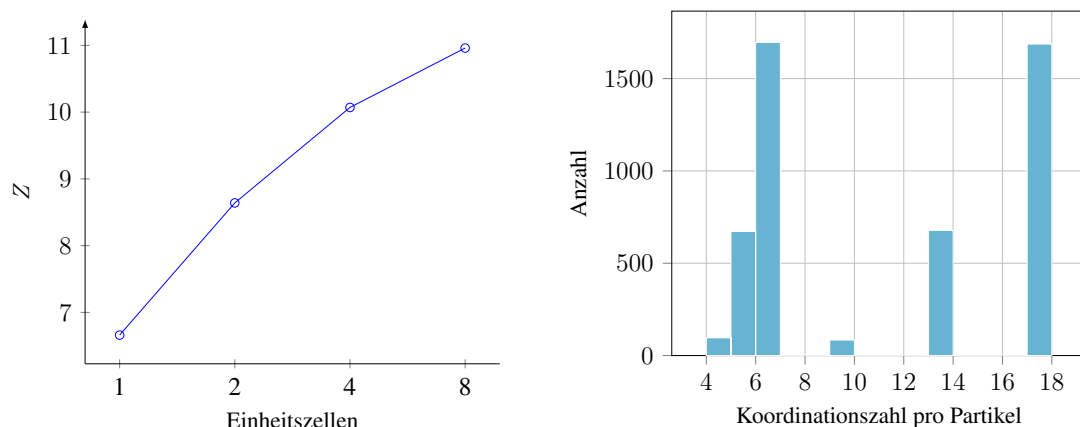


Abb. 3.9: Koordinationszahl einer symmetrischen Packung und Partikelkoordinationszahl für 8 Einheitszellen

Im Vergleich zu den symmetrischen Packungen folgt der Verlauf bei einer zufällig erzeugten Packung einer bestimmten Verteilung. Im nachfolgenden Diagramm ist eine typische

Verteilung der Koordinationszahlen für eine zufällige Packung aufgetragen. In diesem Fall bestehend aus der Korngruppe 4 – 8 mm der Sieblinie B8 nach Kapitel 3.2.1. Im Hintergrund ist eine Normalverteilungsfunktion mit den Parametern $\mu = 13$ und $\sigma^2 = 13$ dargestellt, die mit dem Faktor 5250 skaliert wurde. Aufgrund der guten Übereinstimmung kann von einer Normalverteilung der Koordinationszahlen ausgegangen werden.

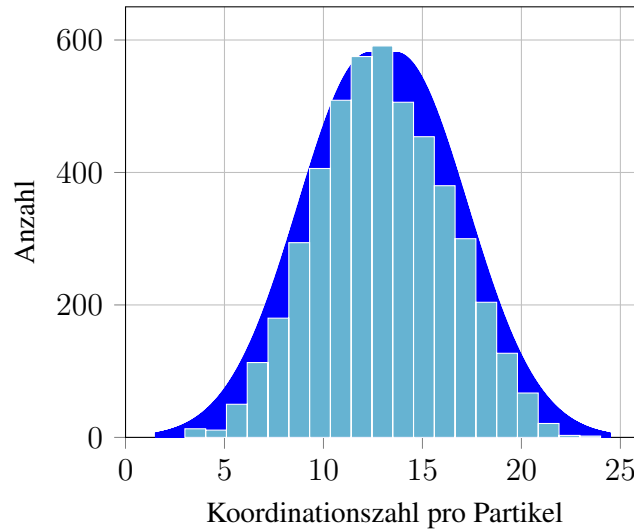


Abb. 3.10: Verteilung der Koordinationszahlen bei einer zufälligen Packung

Die Koordinationszahl der Packung ist ohne die Anwendung der VORONOI-Tessellation bedeutend geringer. Anhand der VORONOI-Zellen werden auch Kontakte zwischen Partikeln definiert, die geometrisch nach Gleichung (2.2) nicht in Kontakt sind. Da im Beton zwischen den Gesteinskörnern der Zementstein angenommen wird, kann auch zwischen zwei Partikeln, die nicht direkt im Kontakt stehen eine Kraftübertragung erfolgen. Die gewählte Beschreibung ist aus diesem Grund physikalisch sinnvoll. Es kann in diesem Zusammenhang auch von einem nicht-lokalen Modell gesprochen werden, da nicht nur die unmittelbar geometrisch in Kontakt stehenden Partikel sondern auch weiter entfernte Partikel in Kontakt stehen können. ŠMILAUER [61] führt einen Faktor R_I ein, um die Koordinationszahl zu erhöhen. Die Partikelradien werden virtuell vergrößert, sodass ein größerer Interaktionsradius entsteht, der zu einer größeren Anzahl an Kontakten führt. Die Gleichung (2.2) wird entsprechend angepasst zu

$$\delta = R_I \cdot (r_1 + r_2) - l_c. \quad (3.9)$$

Auf Basis experimenteller Daten wird in [61] ein Wert von $R_I = 1,5$ empfohlen. Für eine zufällige Packung ist der Einfluss des Parameters auf die Koordinationszahl in Abbildung 3.11 dargestellt. Aus der Kontaktbedingung (2.2) folgt eine Koordinationszahl von $Z = 5,33$, woraus eine sehr geringe makroskopische Steifigkeit der Packung resultiert. Der Einfluss der Koordinationszahl auf die Steifigkeit wird im Anschluss diskutiert.

Die Koordinationszahl aus einer VORONOI-Tessellation, $Z_{\text{voroi}} = 13,1$, ist ebenfalls im Diagramm mit einer roten Linie dargestellt. Der Wert ist in guter Übereinstimmung mit der Koordinationszahl aus dem vorgeschlagenen Interaktionsradius $Z_{R_I=1,5} = 12,96$.

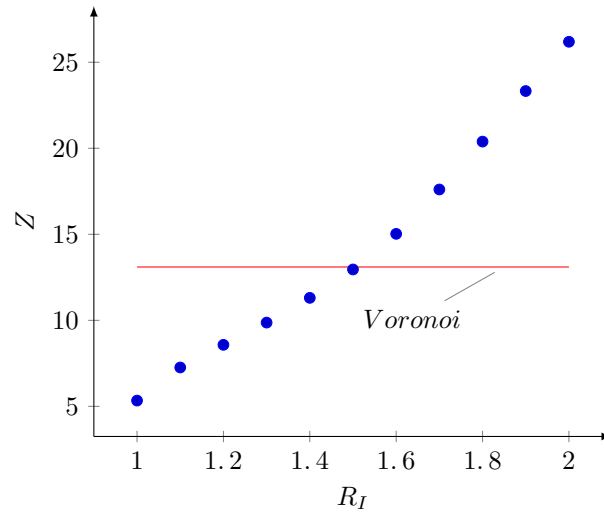


Abb. 3.11: Zusammenhang zwischen R_I und Z

3.3.4 Zufälligkeit

Die Beschreibung der Zufälligkeit einer Packung kann über den Autokorrelationskoeffizienten erfolgen [15]. Dazu werden n Schnitte χ_n mit regelmäßigem Abstand erzeugt und die resultierenden Querschnittsflächen berechnet. $\tilde{\chi} = [\chi_1, \dots, \chi_n]$ kann als Zeitreihe einer Zufallsvariable χ aufgefasst werden.

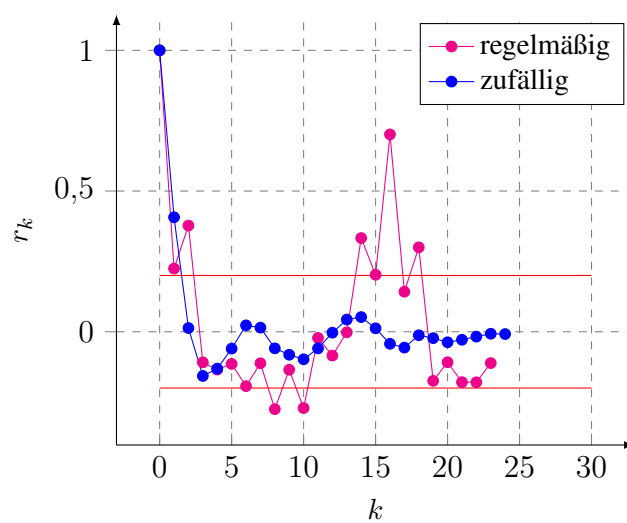
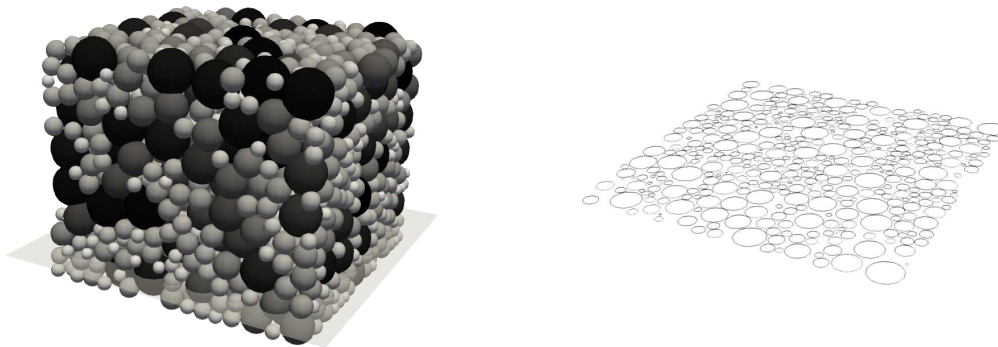


Abb. 3.12: Korrelogramm für verschiedene Partikelanordnungen

Wenn eine Packung rein zufällig ist, dann gibt es keine Korrelation zwischen den Werten von $\tilde{\chi}$. Berechnet wird die Korrelation mit dem Autokorrelationskoeffizienten des Zeitabstandes k

$$r_k = \frac{\sum_{t=1}^{N-k} (x_t - \bar{x})(x_{t+k} - \bar{x})}{\sum_{t=1}^N (x_t - \bar{x})^2} . \quad (3.10)$$

Dieser Koeffizient beschreibt die Korrelation von Zeitschritten, die k Schritte voneinander entfernt liegen. Berechnet werden $k = 1, 2, \dots, M$ Koeffizienten, wobei $M < N$. Wenn die Zeitserie willkürlich ist, dann liegen 95% aller Koeffizienten im Bereich $\pm 2/\sqrt{N}$. Der Zusammenhang ist in Abbildung 3.12 dargestellt. Die horizontalen roten Linien kennzeichnen die obere und untere Schranke des Vertrauensbereichs. In der Abbildung sind die Auswertungen für eine zufällig erzeugte sowie eine regelmäßige Partikelpackung gezeigt. Die regelmäßige Packung ist durch einen stark schwankenden Verlauf gekennzeichnet. Die Korrelation zwischen den einzelnen Schnitten ist erkennbar. Bei der zufälligen Anordnung liegen fast alle Koeffizienten in den zuvor beschriebenen Schranken, sodass die erzeugte Packung in diesem Fall als zufällig bezeichnet werden kann. In Abbildung 3.13 ist eine zufällige Packung und ein ausgewählter Schnitt dargestellt.



(a) Zufälliger Schnitt durch eine Partikelpackung

(b) Resultierende Querschnittsflächen

Abb. 3.13: Schnitte zur Berechnung des Korrelogramms

3.4 Materialparameter

In diesem Abschnitt wird die Wahl der mikroskopischen Materialparameter erläutert und die Auswirkungen auf das makroskopische Verhalten untersucht. Um ein definiertes mechanisches Verhalten abzubilden, muss ein inverses Problem gelöst werden. Das makroskopische Verhalten wird durch die Eigenschaften der Kontakte definiert. Festzulegende Materialparameter sind hier die Normalensteifigkeit k_n , die Kontaktsteifigkeiten in Scherrichtung k_s, k_t sowie die maximale Dehnung ϵ_{\max} und der Faktor $\alpha_{\epsilon n}$ für das Bruchkriterium.

Die Steifigkeit eines Kontaktes in normaler Richtung wird in Abhängigkeit der Radien r_1 und r_2 der beteiligten Partikel festgelegt

$$k_n = 2 \cdot E \frac{r_1 \cdot r_2}{r_1 + r_2}. \quad (3.11)$$

Dieser Ansatz über das harmonische Mittel der Radien wird auch in anderen Arbeiten zur Modellierung von Beton eingesetzt, vgl. [39]. Die Kontaktsteifigkeit ist folglich für Partikel mit gleich großen Radien am höchsten. Je kleiner der Radius eines Partikels, desto kleiner wird auch der Beitrag zur Kontaktsteifigkeit.

Die Kontaktsteifigkeiten in Scherrichtung werden unter Berücksichtigung eines Faktors ν' analog gewählt

$$k_s = k_t = \nu' \cdot k_n. \quad (3.12)$$

Dieser Faktor entspricht nicht der Poisson-Zahl, bestimmt aber maßgeblich die makroskopische Querdehnung einer Packung. Auf die Auswirkungen des Faktors wird im Folgenden noch näher eingegangen.

Die maximale Dehnung für die Bruchbedingung wird für alle Berechnungen zu $\epsilon_{\max} = 0,0025$ festgelegt. Dies entspricht der durchschnittlichen experimentell ermittelten Bruchdehnung von Beton und wird für alle Versuche in dieser Arbeit verwendet.

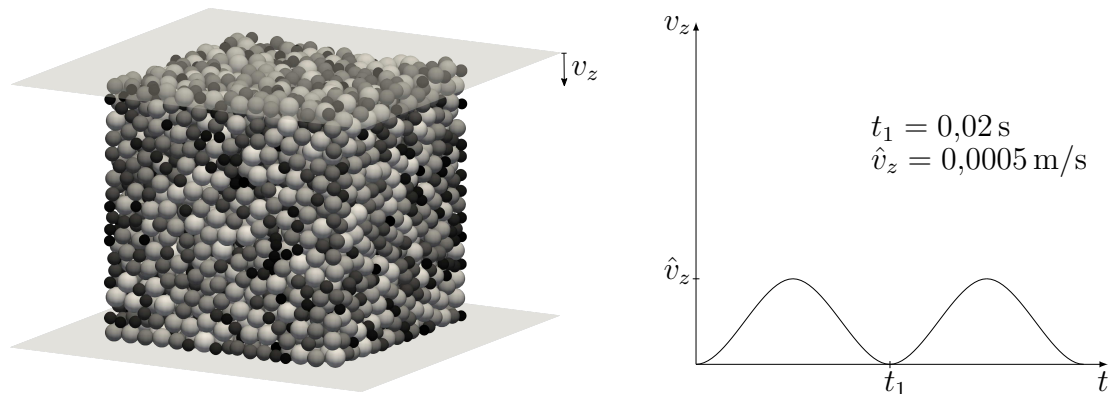


Abb. 3.14: Versuchsaufbau

Der virtuelle Versuchsaufbau wird einem weggesteuerten Versuch in der Realität nachempfunden. Die Probe wird zwischen zwei starren Stahlplatten eingespannt, die einen Reibbeiwert von $\mu_w = 0,3$ aufweisen. Der Einfluss der Wandreibung auf das Ergebnis wird im Laufe dieses Kapitels erfasst. Die Belastungsgeschwindigkeit soll nach DIN EN 12390-3 [1] auf einen Wert von $0,6 \pm 0,2 \text{ N/mm}^2/\text{s}$ eingestellt werden. Die Erfassung von hohen Frequenzen im System aufgrund der hohen Steifigkeit erfordert sehr kleine Zeitschrittweiten. Es wird die von OCKELMANN [40] vorgeschlagene Belastungsgeschwindigkeit übernommen, um angemessene Berechnungszeiten zu erzielen. Die kontinuierliche Regelung der Prüfmaschine wird ebenfalls wie in [40] mit Hermitepolynomen dritter Ordnung beschrieben, die sich mit einer Frequenz von 50 Hz wiederholen. Der Versuchsaufbau mit der zugehörigen Belastungsfunktion ist in Abbildung 3.14 dargestellt.

3.4.1 Bestimmung der Querdehnzahl

Die Querdehnzahl einer zufälligen Packung kann unterschiedlich definiert werden. Im experimentellen Bereich werden auf der Außenseite der Struktur Dehnungsmesstreifen angebracht. Mehrere Versuche mit den zugehörigen Messorten sind z. B. in [36] angegeben. In dem vorliegenden diskrete Elemente Modell sind die Verschiebungen der einzelnen Partikel in ihrem jeweiligen Zentrum bekannt. Ein möglicher Ansatz ist die Interpolation und anschließende Mittelwertbildung der Verschiebungen entlang einer ausgewählten Linie. Bezogen auf die Ausgangslänge kann damit die Querdehnzahl für die einzelnen Koordinatenachsen ermittelt werden. Da die Partikel auch am Rand eine unregelmäßige Verteilung aufweisen, ändert sich das Ergebnis mit der Positionierung der Linie. Um mögliche Randeffekte, z. B. die Querdehnungsbehinderung im Wandbereich und Unregelmäßigkeiten in der Partikelstruktur zu umgehen, schlägt SMILAUER [61] eine Auswertung unter Verwendung von Durchschnittswerten vor. Die Verschiebungen $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ werden für alle Partikel ausgewertet, die in der Mitte des betrachteten Objekts liegen, um die zuvor beschriebenen Effekte auszuschließen. Die Steigung der Ausgleichsgeraden beschreibt dann die durchschnittliche Dehnung. Wird die Hauptdehnung in z-Richtung aufgebracht, kann die Querdehnzahl mit der Gleichung

$$\nu = \frac{0,5 \cdot (\varepsilon_x + \varepsilon_y)}{\varepsilon_z} \quad (3.13)$$

bestimmt werden. Als Beispiel wird die Packung des zuvor beschriebenen Würfels betrachtet. Die nachfolgenden Diagramme in Abbildung 3.15 begründen die interne Auswahl von Partikeln. Auf der linken Seite sind alle Verschiebungen dargestellt, wo der Einfluss der Randbereiche anhand der großen Streuung gut zu erkennen ist. Auf der rechten Seite ist eine interne Auswahl an Partikeln dargestellt, die einen linearen Verschiebungsverlauf erkennbar machen. Außerdem sind in den Diagrammen die jeweiligen Ausgleichsgeraden aus der linearen Regression eingezeichnet.

Werden alle Punkte in der Ermittlung von ν berücksichtigt, ist die berechnete Querdehnzahl kleiner als für den Fall ausgewählter interner Partikel. Für das konkrete Beispiel wird die Querdehnzahl für alle Punkte zu $\nu = 0,1426$ und für die interne Auswahl an Punkten zu $\nu = 0,1677$ bestimmt.

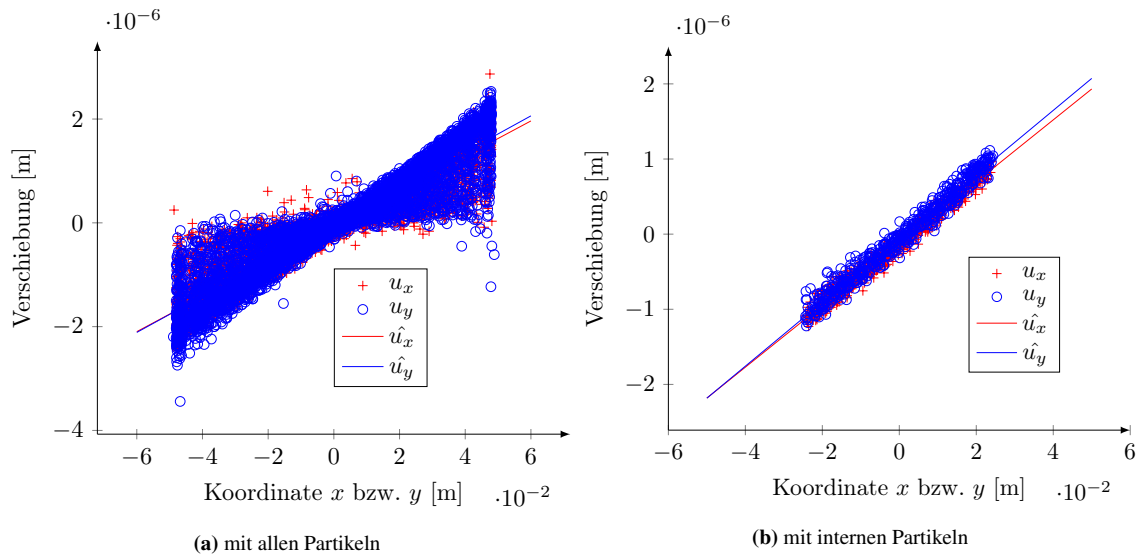


Abb. 3.15: Ermittlung von ν

Die Auswertung für unterschiedliche Verhältnisse k_t/k_n ist in der Abbildung 3.16 dargestellt. Drei verschiedene Packungen aus Sieblinien mit einem Korndurchmesser von 4 – 8 mm wurden in diesem Vergleich verwendet. Obwohl die Packungen rein zufällig erzeugt wurden, ist das makroskopische Verhalten der Packungen im elastischen Bereich sehr ähnlich. Die Steifigkeiten der Schubfedern sind entscheidend für das Querdehnverhalten einer Packung.

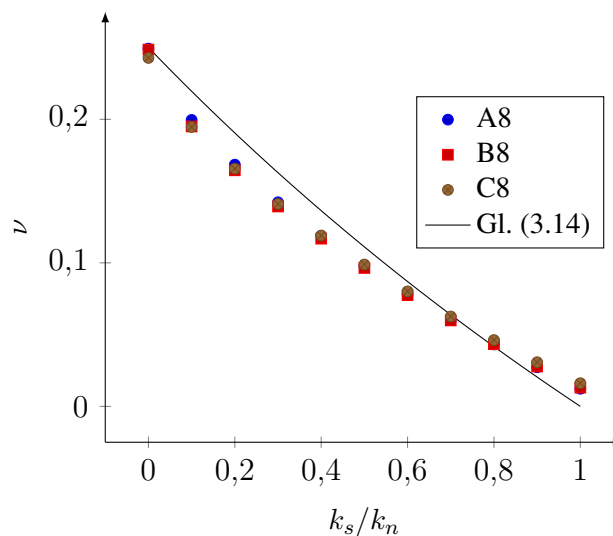


Abb. 3.16: Zusammenhang zwischen k_s/k_n und ν

Je größer die Steifigkeit gewählt wird, desto kleiner wird die Querdehnung. Werden keine Schubfedern angesetzt, beträgt die maximale Querdehnung $\nu \approx 0,25$. In Analogie zu der „microplane-theory“ von BAZANT [6] leitet KÜHL [31] den analytischen Zusammenhang

$$\nu = \frac{1 - k_s/k_n}{4 + k_s/k_n} \quad (3.14)$$

unter der Annahme linear-elastischen Materialverhaltens und einer linear-elastischen Kontaktbedingung her. Aus der Gleichung folgt eine Obergrenze für $\nu = 0,25$, die auch mit dem vorliegenden Modell nicht überschritten wird. Für größere Querdehnungen müssen negative Schubsteifigkeiten angesetzt werden, die physikalisch nicht interpretierbar sind. Die Gleichung 3.14 ist zum Vergleich zusammen mit den vorliegenden Ergebnissen der ausgewählten Packungen in Abbildung 3.16 dargestellt. Ähnlichkeiten des vorliegenden Modells zu dem microplane - Modell können hieraus abgeleitet werden.

3.4.2 Steifigkeit

Die Steifigkeit auf makroskopischer Ebene ist von verschiedenen Einflussgrößen auf mikroskopischer Ebene abhängig. Gezeigt werden an dieser Stelle die Abhängigkeit des E-Moduls von dem Verhältnis der lokalen Federsteifigkeiten k_s/k_n und von der Packungsdichte. Die Ermittlung der Spannungen erfolgt über die Summe der Kräfte der Partikel-Wand-Kontakte bezogen auf die Seitenfläche des Würfels. Die globalen Dehnungen sind von der weggesteuerten Wand bekannt.

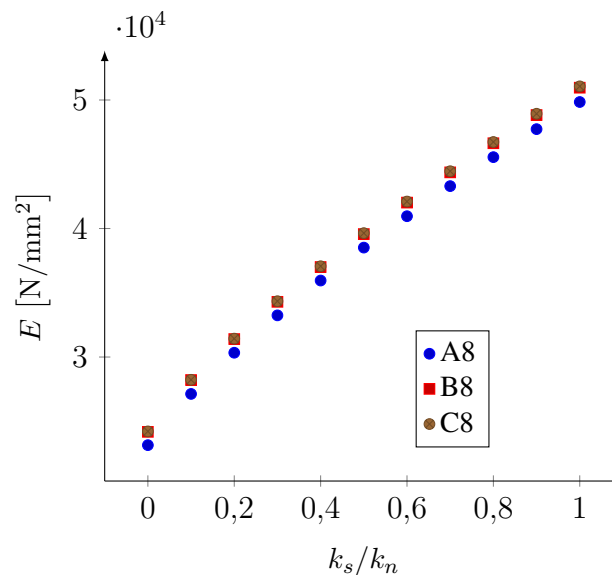


Abb. 3.17: Zusammenhang zwischen k_s/k_n und E

In Abbildung 3.17 sind die ermittelten Steifigkeiten für drei verschiedene Packungen unter Variation von ν' dargestellt. Je größer das Verhältnis der Federsteifigkeiten gewählt

wird, desto höher ist die makroskopische Steifigkeit der Packung. Die Erhöhung der internen Schubsteifigkeiten führt demnach auch zur Erhöhung der makroskopischen Steifigkeit, wobei der Zusammenhang nichtlinear ist.

Ein weiterer Einflussfaktor auf die Steifigkeit ist die Packungsdichte. In Abbildung 3.18 sind die Packungsdichten ausgewählter Packungen und die ermittelte makroskopische Steifigkeit aufgetragen. Die Berechnung erfolgt an acht Packungen, deren Materialparameter identisch mit $E = 30000 \text{ N/mm}^2$ und $\nu' = 0,2$ gewählt werden.

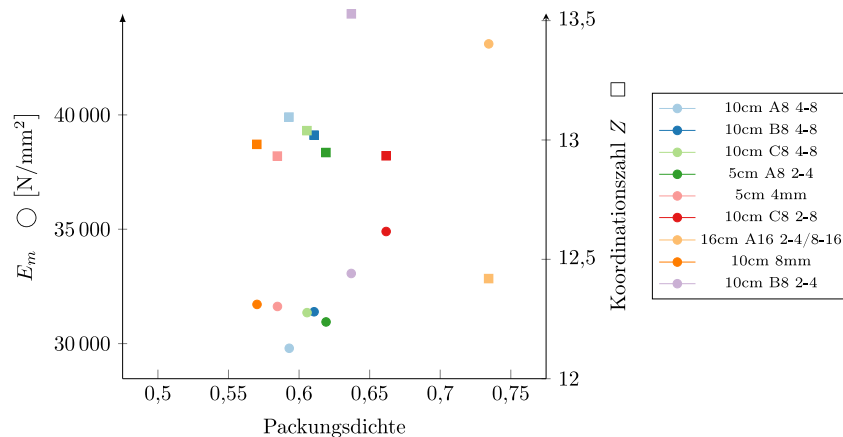


Abb. 3.18: Zusammenhang zwischen Packungsdichte, Koordinationszahl und E

Die Packungen variieren sowohl in der Größe als auch in der Korngrößenverteilung. Die Bezeichnung „10cm A8 4-8“ beschreibt einen Würfel der Kantenlänge 10 cm erstellt mit der Sieblinie A8 nach Abschnitt 3.2.1 mit Partikeldurchmessern von 4-8mm. Aus den Ergebnissen kann keine klare Abhängigkeit des E-Moduls von der Packungsdichte hergeleitet werden. Packungsdichten oberhalb von 0,65 zeigen allerdings signifikante Unterschiede. Der bessere Korn-zu-Korn-Kontakt bewirkt eine höhere Steifigkeit.

Die Koordinationszahlen weichen bis auf zwei Packungen nur gering voneinander ab. Ein Grund liegt in der Beschreibung der Kontakte über eine VORONOI-Tessellation, die bei den betrachteten Packungen meistens zu einer Koordinationszahl von etwa $Z = 13$ führt. Ein direkter Zusammenhang zwischen Packungsdichte und Koordinationszahl kann hieraus nicht abgeleitet werden.

3.4.3 Druckfestigkeit

In diesem Abschnitt werden die Einflüsse mikroskopischer Parameter auf die makroskopischen Eigenschaften untersucht. Hierfür werden verschiedene Druckversuche an virtuell erzeugten Proben durchgeführt. Die Variation des Faktors auf die Schubsteifigkeit ν' wird mit Hilfe der nachfolgenden Diagramme erläutert. Es werden drei Packungen entsprechend dem Vorgehen nach Abschnitt 3.2.1 erzeugt. Ein Würfel mit einer Kantenlänge von

10 cm wird mit Partikeln im Größenbereich von 4–8 mm gefüllt. Die Durchmesser der Partikel werden in dem beschriebenen Intervall gleichverteilt modelliert. Eine Steigerung der Steifigkeit bei Erhöhung von ν' ist in allen drei Packungen zu erkennen. Gleichzeitig steigt mit zunehmender Quersteifigkeit die Bruchlast des Körpers an. Obwohl annähernd gleiche Korngrößenverteilungen vorliegen, gibt es in der Höhe der Bruchlast zum Teil erhebliche Unterschiede. Ein Grund hierfür ist die Lasteinleitung, die bei einer nicht homogenen Verteilung der Partikel am Rand, zu Spannungskonzentrationen führen kann.

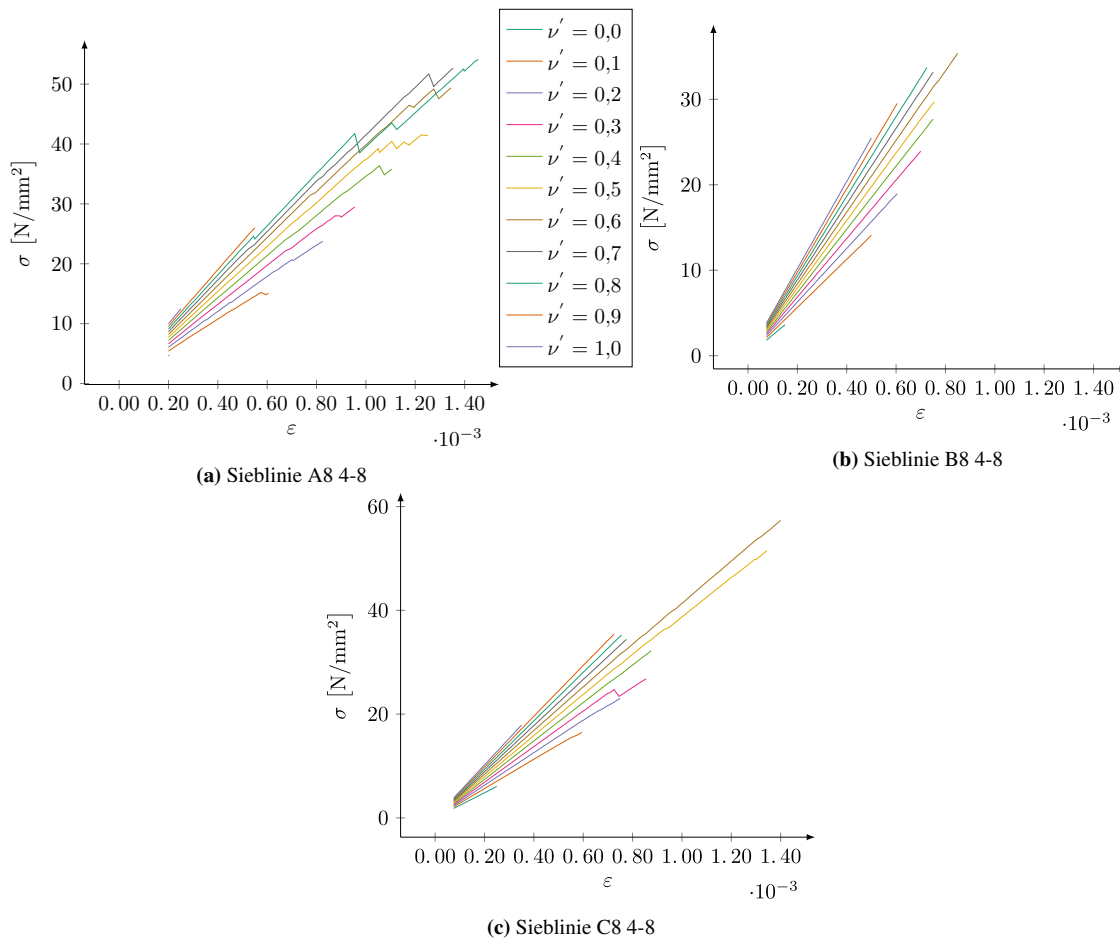


Abb. 3.19: Spannungs-Dehnungslinien für drei verschiedene Packungen

Das Hinzufügen zusätzlicher Steifigkeit über die Schubfedern bewirkt eine Zunahme der Bruchdehnungen. Werte ab $\nu' \geq 0,5$ zeigen tendenziell kleinere Bruchdehnungen. Die Ausschläge in einzelnen Verläufen und der damit verbundene Steifigkeitsabfall sind auf das Versagen einzelner Kontakte im Probekörper zurückzuführen.

Sowohl die Bruchdehnung als auch die Bruchlast, können über den im Bruchkriterium festgelegten Faktor $\alpha_{\varepsilon n}$ gesteuert werden. OCKELMANN [40] rechnet für die regelmäßigen Packungen mit einem Wert von $\alpha_{\varepsilon n} = 10$. In Abbildung 3.20 sind die Berechnungsergebnisse für eine zufällige Packung unter Variation von $\alpha_{\varepsilon n}$ dargestellt. Die Spannungs-

Dehnungslinien stimmen mit den Erwartungen überein. Das Bruchkriterium steuert nur den Versagenszeitpunkt. Die Steifigkeit der Packung bleibt hiervon unberührt. In der Abbildung 3.20b sind die erzielten Druckfestigkeiten über die gewählten Faktoren $\alpha_{\varepsilon n}$ dargestellt. Es zeigt sich ein stark nichtlinearer Zusammenhang, der auf die Versagenmechanismen der Packung zurückzuführen ist.

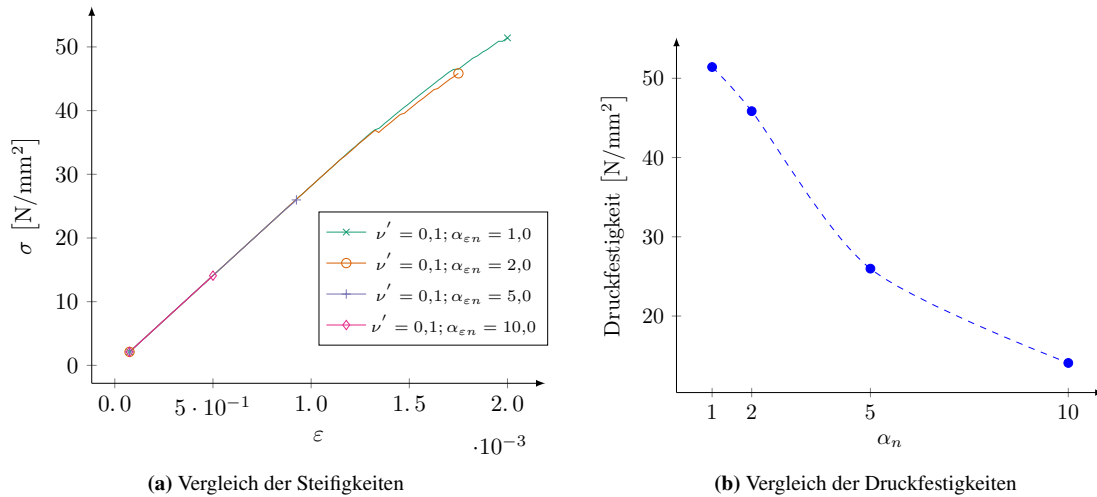


Abb. 3.20: Variation von $\alpha_{\varepsilon n}$

Abbildung 3.21 zeigt Ergebnisse von sechs Berechnungen bei drei unterschiedlichen Querdehnzahlen und zwei Bruchfaktoren. Auch hier sind der Anstieg der globalen Steifigkeit, höhere Bruchlasten und größere Bruchdehnungen bei Erhöhung der Quersteifigkeiten zu erkennen.

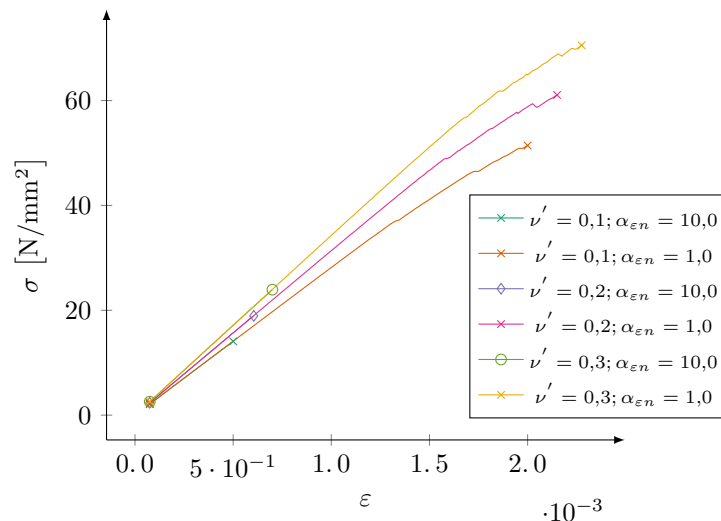


Abb. 3.21: Variation von ν' und $\alpha_{\varepsilon n}$

Die Wandreibung beeinflusst die Querdehnung der Packung im Lasteinleitungsbereich. Je größer μ_w gewählt wird, desto größer ist die Querdehnungsbehinderung. In Abbildung

3.22 ist der Einfluss auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten einer Packung dargestellt. Die Parameter der Packung werden konstant gehalten und die Wandreibung zwischen 0,0 – 0,3 variiert. Bei allen Berechnungen liegen die Bruchdehnungen bei etwa 2‰ und auch die Druckfestigkeiten zeigen keine signifikanten Unterschiede. Die Wandreibung muss allerdings größer null gewählt werden, um einen stabilen Berechnungsablauf zu gewährleisten. Es werden keine weiteren Randbedingungen gesetzt, sodass eine Rotation des Probekörpers zwischen den Platten möglich ist. Dies zeigt sich in den Abweichungen der blauen Kurve im Vergleich zu den übrigen Verläufen.

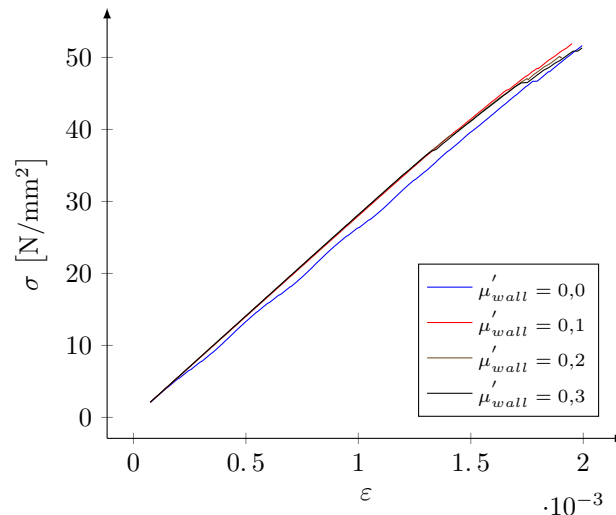


Abb. 3.22: Einfluss der Wandreibung auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten

Die Bruchbilder der erstellten Probekörper sind je nach gewähltem Parametersatz und der Belastungsart sehr unterschiedlich. Die Belastung der Probekörper erfolgt in der Praxis in der Regel nicht in der Betonierrichtung. Die glatten Schalungsflächen sind besser für eine gleichmäßige Lasteinleitung geeignet.

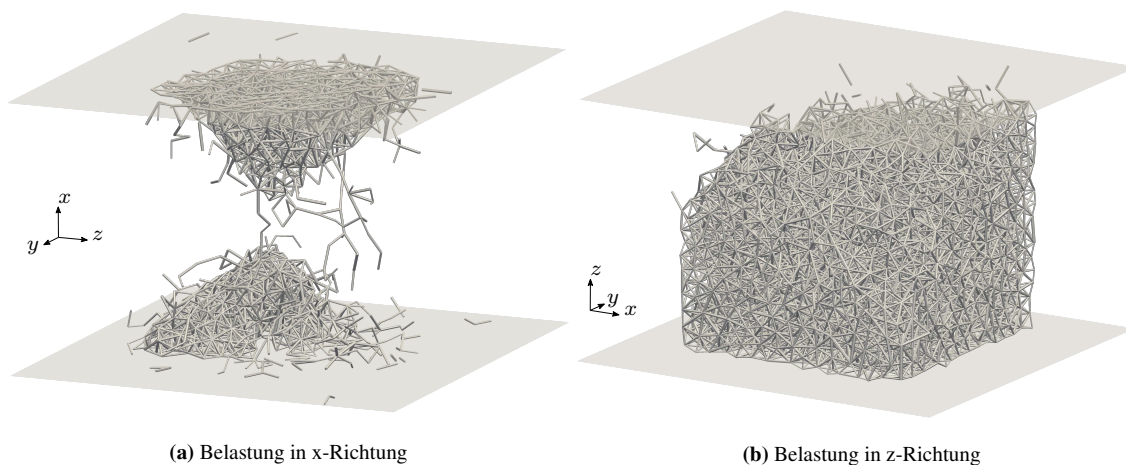


Abb. 3.23: Bruchbilder für verschiedene Belastungsrichtungen

Abbildung 3.23 zeigt die Bruchbilder für eine Belastung in x-Richtung und in z-Richtung, die gleichzeitig auch die Betonierrichtung ist. Für die Übersichtlichkeit werden nur Festkörperkontakte gezeigt, die noch intakt sind. Auf die Darstellung der einzelnen Partikel wird verzichtet. In linken Teilbild zeigt sich ein charakteristisches Bruchbild für einen Würfel. Die Flächen an den Lasteinleitungsflächen sind nahezu ungeschädigt und ein Bruchkegel bildet sich aus. Gravitationskräfte werden in der Simulation nicht berücksichtigt, sodass der obere Kegel an seiner Position bleibt. Die Belastung in Betonierrichtung zeigt eine deutliche Schädigung im Lasteinleitungsbereich. Inhomogenitäten, die infolge des Erstellungsprozesses an der Oberseite entstehen, sorgen für Spannungskonzentrationen. Diese führen zu einem Versagen im Einleitungsbereich. Die Ausbildung eines charakteristischen Bruchkegels ist nicht erkennbar.

Die kontinuumsmechanische Beschreibung dieses Phänomens ist nur schwierig bis gar nicht möglich. Hier zeigt sich der Vorteil der diskontinuierlichen Beschreibung mit diskreten Elementen.

Im vorherigen Abschnitt wurde bereits der Einfluss des Faktors $\alpha_{\varepsilon n}$ auf die Spannungs-Dehnungs-Verläufe gezeigt. Der Einfluss auf das Bruchbild wird anhand der folgenden Abbildung deutlich. Die Packung ist identisch zu der in Abbildung 3.23a mit dem Unterschied, dass $\alpha_{\varepsilon n} = 1$ anstatt $\alpha_{\varepsilon n} = 5$.

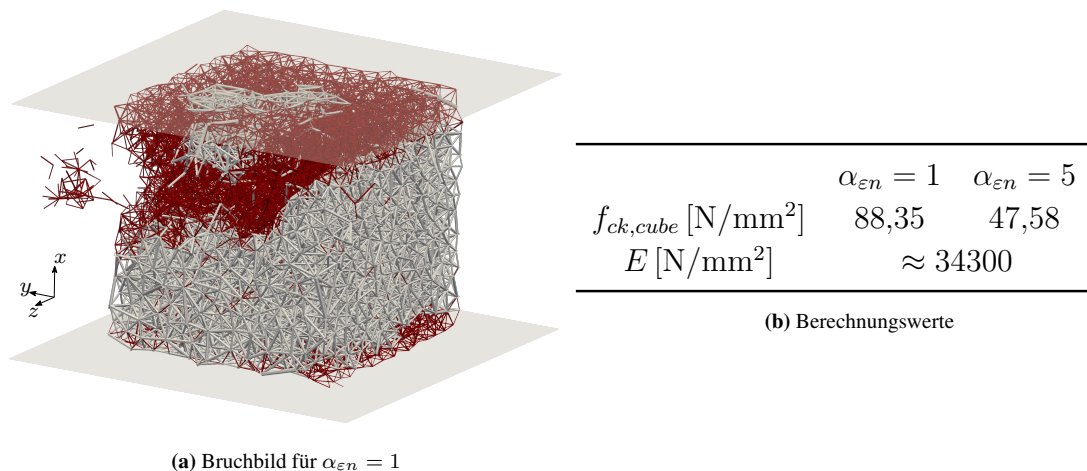


Abb. 3.24: Bruchbild und Vergleichswerte für Faktoren $\alpha_{\varepsilon n}$

Die Schub- und Zugdehnungen werden für $\alpha_{\varepsilon n} = 1$ in gleichem Maße berücksichtigt. In dem Bruchbild ist ein Schubversagen erkennbar. Je höher der Faktor gewählt wird, desto dominanter wird der Querkzug und der charakteristische Bruchkegel kann sich einstellen. Die Ergebnisse für den Faktor $\alpha_{\varepsilon n} = 5$ sind sowohl im Bruchbild als auch in den Berechnungsergebnissen in guter Übereinstimmung mit den Druckfestigkeitsklassen nach Eurocode 2. Der hier erzeugte Probekörper kann zwischen den Festigkeitsklassen C35/45 und C40/50 eingeordnet werden. Die sehr hohe Druckfestigkeit für den Probe-

körper mit $\alpha_{\varepsilon n} = 1$ steht nicht in Relation zu der Steifigkeit. Die Steifigkeit in diesem Druckfestigkeitsbereich liegt nach Eurocode 2 zwischen $41000 - 42000 \text{ [N/mm}^2\text{]}$.

Einfluss des Interaktionsfaktors auf die Druckfestigkeit

Der bereits in Gleichung (3.9) eingeführte Interaktionsradius R_I erhöht die Koordinationszahl durch zusätzliche nichtlokale Kontakte zu Partikeln im definierten Umkreis. Wird der Interaktionsradius bereits bei der dynamischen Erstellung der Packung genutzt, folgt daraus eine Packung mit kleiner Dichte. Eine erstellte Packung mit einem Interaktionsradius $R_I = 1,5$ und den Kontakten aus einer anschließenden VORONOI-Tessellation ist in Abbildung 3.25a dargestellt. Die Packungsdichte beträgt lediglich $19,3\%$ und damit nur etwa ein Drittel einer vergleichbaren Packung mit einem Interaktionsradius von $R_I = 1,0$. Auch die makroskopische Steifigkeit der Packung beträgt im Vergleich mit $16478,77 \text{ N/mm}^2$ nur die Hälfte. Eine gleichmäßige Lasteinleitung kann aufgrund der geringen Anzahl an Partikeln an der Oberfläche nicht sichergestellt werden. Der Körper versagt im Lasteinleitungsbereich. Aus den genannten Gründen, wird die Berücksichtigung des Interaktionsfaktors bei der Erstellung einer Packung an dieser Stelle nicht weiter verfolgt. Wenn eine Berücksichtigung stattfinden soll, ist ein deutlich kleinerer Interaktionsradius als $R_I = 1,5$ zu empfehlen.

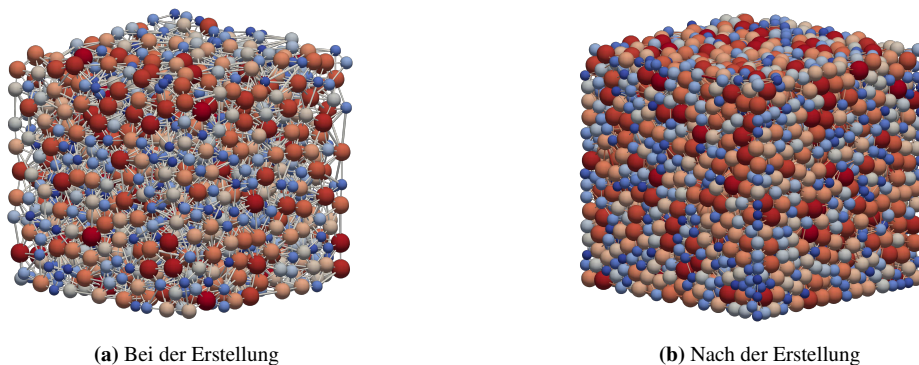


Abb. 3.25: Vergleich einer Packung mit der Berücksichtigung von $R_I = 1,5$ zu verschiedenen Zeitpunkten

Die Berücksichtigung des Interaktionsfaktors nach der Erstellung vergrößert die Koordinationszahl der einzelnen Partikel und führt damit zu einer deutlich größeren Steifigkeit. Abbildung 3.25b zeigt einen Würfel mit der gleichen Korngrößenverteilung wie in Abbildung 3.25a. Für die Erstellung der Packung wird ein Interaktionsradius von $R_I = 1,0$ genutzt und im Anschluss werden die Festkörperkontakte mit einem Interaktionsradius $R_I = 1,5$ erzeugt. Die Packung weist mit $0,57$ eine deutlich höhere Dichte auf und auch die makroskopischen Steifigkeit ist mit 33316 N/mm^2 mehr als doppelt so hoch.

Der Einfluss des Interaktionsradius nach dem Erstellen einer Packung auf die makroskopische Steifigkeit E_{cm} ist in Abbildung 3.26 zu sehen. Mit einem Interaktionsradius von $R_I = 1,5$ wird der mittlere E-Modul im Vergleich $R_I = 1,0$ mehr als vervierfacht.

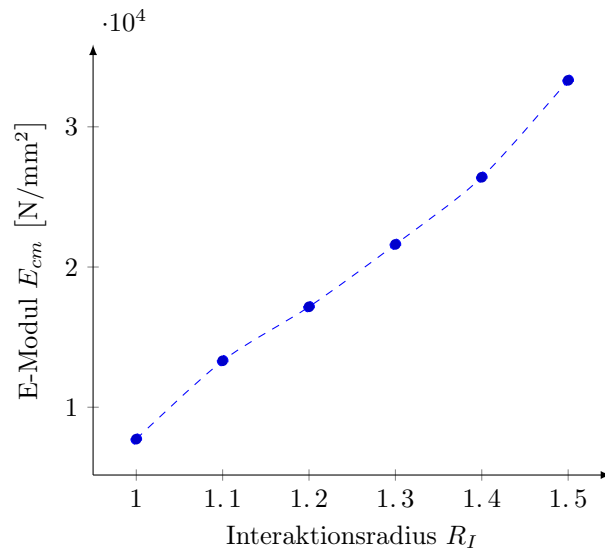


Abb. 3.26: Makroskopische Steifigkeit in Abhängigkeit vom Interaktionsradius

3.4.4 Zugfestigkeit

Die Zugfestigkeit des Betons beträgt in der Regel nur etwa zehn Prozent der Druckfestigkeit und wird in der Bemessung meist auf sicherer Seite vernachlässigt. Die Bestimmung der Zugfestigkeit erfolgt in der Praxis häufig indirekt über Spaltzugversuche oder Biegezugversuche. Die Schwierigkeit bei einem direkten Zugversuch besteht in der Herstellung der Lasteinleitung in den Probekörper. Die Lasteinleitungsmethoden Klebung, Klemmwirkung und Verbundstäbe werden in [48] beschrieben und auf die Anwendbarkeit untersucht. Bei einer Klebeverbindung muss ein guter Verbund zwischen dem Kleber und dem Beton hergestellt werden, damit der Probekörper nicht in der Verbundzone versagt. Im numerischen Modell kann eine Klebeverbindung durch geeignete Randbedingung modelliert werden, da keine zusätzlichen Konstruktionen für die Lasteinleitung benötigt werden. Alle Partikel auf dem Rand werden mit einer Randbedingung für die Geschwindigkeit versehen.

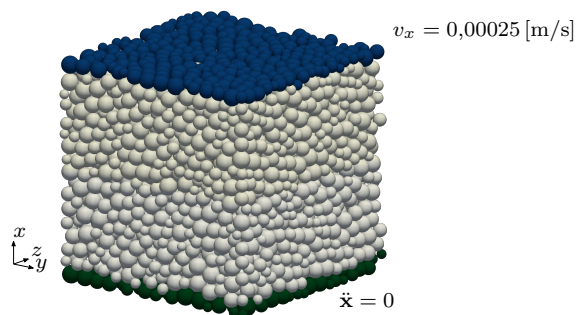


Abb. 3.27: Randbedingungen für Zugversuche

Dies simuliert einen festen Verbund zwischen der Prüfeinrichtung und dem Probekörper. Die Randbedingungen für die Zugversuche sind Abbildung 3.27 zu entnehmen. Die oberste Schicht blau eingefärbter Partikel wird mit einer Geschwindigkeit von $v_x = 0,00025 \text{ m/s}$ in x-Richtung gezogen. Gleichzeitig werden die Beschleunigungen der untersten Schicht grün eingefärbter Partikel zu null gesetzt, sodass eine Einspannung erzeugt wird. Die gleichmäßige Lasteinleitung ist am Verzerrungszustand ε_x in Abbildung 3.28a zu erkennen. Die Einspannwirkung wird bei der Betrachtung der Querverzerrungen $\varepsilon_y, \varepsilon_z$ sichtbar, vgl. Abbildung 3.28b und 3.28c. Die gewählte Art der Lasteinleitung, lässt auch Querdehnungen im Lasteinleitungsbereich zu, die bei einer Verklebung so nicht auftreten.

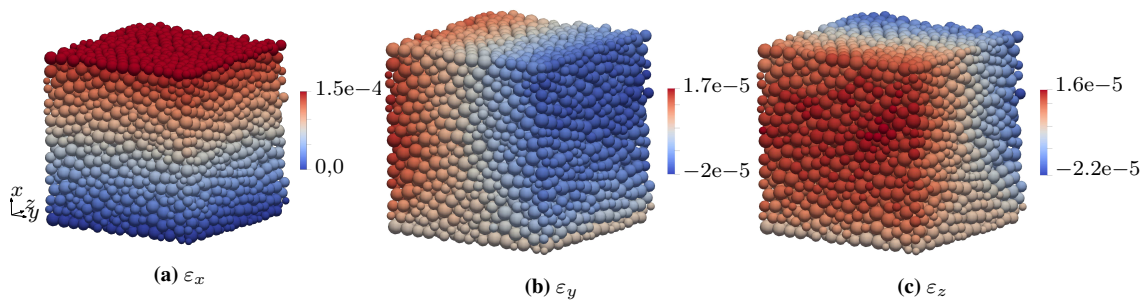


Abb. 3.28: Verschiebungen der Partikel unter Zugbeanspruchung

Das Bruchverhalten unter Zugbeanspruchung ist nicht vorhersagbar. Charakteristisch sind jedoch die Bruchflächen senkrecht zur Beanspruchungsrichtung. Die Höhe der Bruchfläche variiert je nachdem, wo die Schädigung im Material beginnt. Bei der Untersuchung von normalfestem Beton zeigt sich im Experiment ein Rissverlauf durch die Zementmatrix entlang der Gesteinskörnung. Die Gesteinskörnung hat eine höhere Festigkeit als die umgebende Zementmatrix und versagt daher in der Regel nicht. Die Partikel als Repräsentanten der Gesteinskörnung im numerischen Modell können sich nicht teilen, sodass ein Trennriss immer durch die Matrix verläuft.

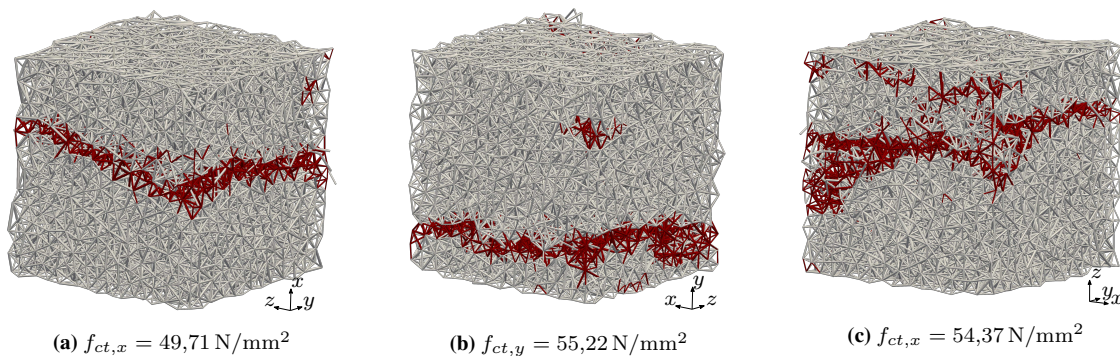


Abb. 3.29: Bruchbilder für uniaxialen Zug

Eine Abbildung von hochfesten Betonen hinsichtlich des experimentell beobachteten Rissbildes ist mit dem vorhandenen Modell nicht möglich. Eine Möglichkeit ist die Abbildung

einzelner Gesteinskörner als Clusterstruktur. So kann auch der Riss durch ein Gesteinskorn beschrieben werden. Der numerische Aufwand steigt jedoch enorm an. Von dem Punkt der Erstrissbildung bilden sich weitere Risse, bis es zur vollständigen Trennung des Probekörpers kommt. In Abbildung 3.29 sind die Bruchbilder für uniaxiale Zugversuche in x-, y- und z-Richtung dargestellt. Die gerissenen Kontakte sind rot gekennzeichnet. Die zuvor beschriebenen Charakteristiken sind gut erkennbar. Die in der numerischen Simulation ermittelten Zugfestigkeiten für $\alpha_{\varepsilon n} = 1$ sind in der Abbildung angegeben und haben dieselbe Größenordnung. Das Bruchbild zeigt einen charakteristischen Zugbruch, lässt aber keinen Rückschluss auf die Bruchlast zu.

Die Höhe der Bruchlast kann über den Parameter $\alpha_{\varepsilon n}$ gesteuert werden. Die Auswirkungen auf das Bruchbild sind in Abbildung 3.30 zusammengefasst. Auch hier ist ein Wandern der Bruchebene zu erkennen. Eine direkte Abhängigkeit der Höhe der Bruchebene zum Parameter $\alpha_{\varepsilon n}$ kann nicht festgestellt werden. Die angegebenen Zugfestigkeiten liegen teilweise weit über den Rechenwerten nach Eurocode 2, der die mittlere Zugfestigkeit in Abhängigkeit der Zylinderdruckfestigkeit definiert

$$f_{ctm} = 0,3 \cdot f_{ck,cyl}^{2/3}.$$

Die Zugfestigkeit aus Abbildung 3.30b kann direkt mit der Druckfestigkeit aus der Tabelle 3.24b verglichen werden. Zu dieser Druckfestigkeit sollte die mittlere Zugfestigkeit im Bereich von $\approx 3,5 \text{ N/mm}^2$ liegen. Der Parameter $\alpha_{\varepsilon n}$ muss je nach Belastungssituation gewählt werden, um entweder den Druckbereich oder den Zugbereich adäquat zu erfassen.

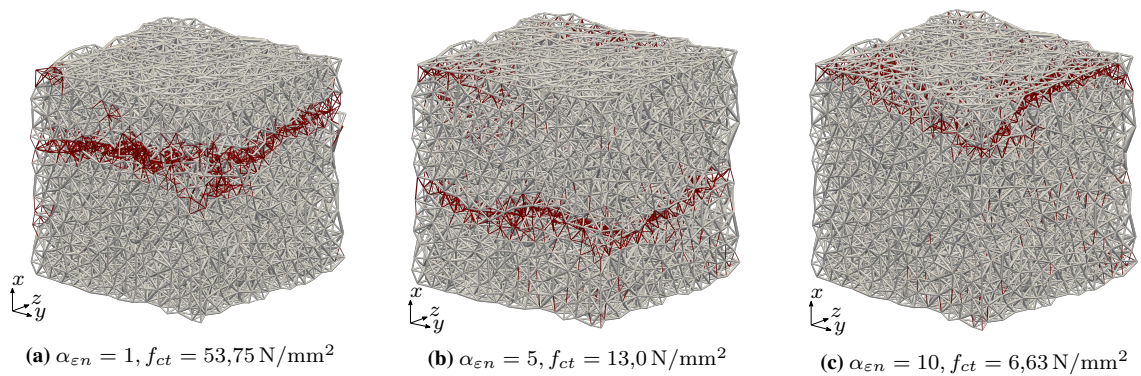


Abb. 3.30: Bruchbilder bei Variation des Parameters $\alpha_{\varepsilon n}$

Die Berechnung von Zugversuchen zeigt den Vorteil der diskreten Modellierung gegenüber klassischen Kontinuumsmechanik auf. Die Inhomogenitäten innerhalb der Struktur werden explizit erfasst, sodass keine künstlichen Schwachstellen implementiert werden müssen. Bei einer FE-Berechnung mit Berücksichtigung von Schädigung müssen Steifigkeitsparameter gestreut werden, um eine Bruchfläche zu erhalten. Die gleichmäßige Spannungs- und Dehnungsverteilung sorgt ansonsten für eine konstante Schädigungsverteilung im gesamten Körper.

4 Modellierung der Wärmeleitung und -speicherung

Bauwerke aus Beton sind sehr häufig thermischen Belastungen ausgesetzt. Dazu zählen sowohl die jährlichen gleichmäßigen Temperaturschwankungen als auch ungleichmäßige Temperaturbelastungen wie Sonneneinstrahlung und der Brandfall. Unterschiedliche Temperaturen können sich negativ sowie positiv auf den Beton auswirken, z. B. Volumenänderungen bei Frost oder Hitze.

Die Wärmeleitung in einem Festkörper wird als Energiebilanz mit der Temperatur $T(x,t)$ und dem Wärmefluss $q(x,t)$ beschrieben:

$$\rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = q_v. \quad (4.1)$$

Der erste Term beschreibt die Wärmespeicherung, die mit der Dichte ρ , der spezifischen Wärmekapazität c_v und der zeitlichen Änderung der Temperatur $\partial T / \partial t$ definiert ist. Der zweite Term beschreibt die Wärmeleitung mit der räumlichen Ableitung des Wärmestroms q_i . Auf der rechten Seite der Gleichung sind externe Wärmequellen bzw. -senken zusammengefasst.

Mit dem FOURIERSchen Gesetz wird der Zusammenhang zwischen dem Wärmestrom q_i und dem Temperaturgradienten $\partial T / \partial x_j$ mit dem Wärmeleitfähigkeitstensor k_{ij} beschrieben

$$q_i = -k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (4.2)$$

Das negative Vorzeichen folgt aus der Bedingung, dass der Wärmestrom von warm nach kalt fließt. Wird Gleichung (4.2) in (4.1) eingesetzt, folgt die Energiebilanz für die Wärmeleitung in allen drei Raumrichtungen

$$\rho c_v \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + k_{ij} \nabla T = q_v. \quad (4.3)$$

Die Energiebilanz dient zur Beschreibung der Wärmeleitung in einem Kontinuum und wird im folgenden Abschnitt im Kontext der diskreten Elemente Methode aufbereitet.

4.1 Diskretisierung der Energiebilanz

Die Beschreibung der Wärmeleitung mit der diskreten Elemente Methode erfordert ein grundsätzlich anderes Vorgehen. Um das Wärmeleitproblem im diskreten Modell abzubilden, sind einige Umformungen notwendig. Das Berechnungsgebiet ist auf einzelne Partikel zusammengefasst, die durch Punkte repräsentiert werden. Die Temperatur wird als zusätzlicher Freiwert an jedem Partikel konstant angesetzt. Es wird davon ausgegangen, dass der Wärmetransport hauptsächlich über das Festkörpergerüst erfolgt und in vernachlässigbarem Maße über die gasförmige Phase in den Poren. Die Wärmeleitung wird

deshalb ausschließlich über Wärmeleitmodule zwischen zwei in Kontakt stehenden Partikeln abgebildet. In der Abbildung 4.1 ist dies für die einfachste Konfiguration dargestellt.

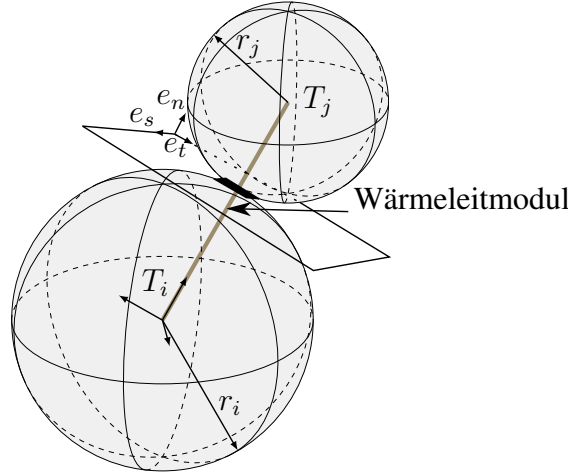


Abb. 4.1: Definition des Wärmeleitmoduls in der dreidimensionalen Konfiguration

Das Wärmeleitmodul verläuft vom Mittelpunkt des Partikels i zum Mittelpunkt des Partikels j und hat damit die Länge ℓ_{ij}

$$\ell_{ij} = r_i + r_j ,$$

wobei r_i und r_j die Radien der beteiligten Partikel bezeichnen. Mit der zuvor hergeleiteten Gleichung kann ein Wärmestrom in jede beliebige Raumrichtung beschrieben werden. Das Wärmeleitmodul schränkt die Richtung ein. Die nachfolgend dargestellten Schritte zur diskreten Wärmeleitungsgleichung orientieren sich an [3].

Der durchschnittliche Wert der Divergenz von q_i kann ausgedrückt werden mit dem Integral über ein Volumen V

$$\left\langle \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{1}{V} \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV . \quad (4.4)$$

Das Volumenintegral wird mit Hilfe des GAUBSchen Divergenztheorems in das Oberflächenintegral über die Oberfläche S

$$\frac{1}{V} \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV = \int_S q_i n_i dS \quad (4.5)$$

überführt. Der Vektor \mathbf{n} steht dabei senkrecht auf der Oberfläche eines Partikels. Wenn der Wärmefluss nur durch N Wärmeleitmodule erfolgt, kann das Oberflächenintegral auch als Summe geschrieben werden und zur Wärmeleistung Q_p im Wärmeleitmodul zusammengefasst werden

$$\int_S q_i n_i dS = \sum_{p=1}^N q_i^p n_i^p \Delta S^p = \sum_{p=1}^N Q^p . \quad (4.6)$$

Daraus folgt eingesetzt in (4.4)

$$\left\langle \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{1}{V} \sum_{p=1}^N Q^p. \quad (4.7)$$

Nach Einsetzen in (4.1) kann die Wärmeleitungsgleichung für ein Partikel angegeben werden zu

$$mc_v \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{V} \sum_{p=1}^N Q^p = Q_v. \quad (4.8)$$

Wie bereits zuvor erwähnt wird die Temperatur im Partikel konstant angesetzt. Die räumliche Ausdehnung eines einzelnen Partikels ist im Verhältnis zu den Gesamtabmessungen eines Bauteils allerdings sehr klein. Ein möglicher interner Temperaturgradient in radialer Richtung wird daher in dieser Arbeit in guter Näherung vernachlässigt. In der Arbeit von [20] wird eine vollständige zweidimensionale Beschreibung gezeigt. Die Bilanzgleichung (4.1) wird ab dieser Stelle in etwas abgeänderter Notation

$$C_i \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_{j=1}^m Q_{ij} = Q_{ext} \quad (4.9)$$

verwendet. Die Speichervariable C_i ist das Produkt aus der Dichte ρ_i , der spezifischen Wärmekapazität c_v und dem Volumen V_i des Partikels. Die Wärmeleistung Q_{ij} folgt aus der Temperaturdifferenz und dem Wärmeleitwert

$$Q_{ij} = k_{ij} \cdot (T_j - T_i). \quad (4.10)$$

Die Wärmeleiteigenschaften werden individuell an jedem einzelnen Partikel definiert. So ist eine Differenzierung unterschiedlicher Materialien möglich. Der festzulegende Materialparameter ist der Wärmewiderstand η . In Abhängigkeit der Radien kann der Wärmewiderstand des Wärmeleitmoduls R_{ij} angegeben werden zu

$$R_{ij} = \eta_i \cdot r_i + \eta_j \cdot r_j. \quad (4.11)$$

Der Kehrwert des Wärmewiderstands ist der in Gleichung (4.10) eingeführten Wärmeleitwert

$$k_{ij} = \frac{1}{R_{ij}}.$$

4.1.1 Bestimmung des Wärmewiderstands

Die Bestimmung des Wärmewiderstands der Wärmeleitmodule kann aus dem makroskopischen Wärmeleitwert λ hergeleitet werden. Das hier beschriebene Vorgehen ist auch in

dem kommerziellen Programm PFC 5.0 [3] auf diese Weise umgesetzt. Der durchschnittliche Wärmestrom $\langle q_i \rangle$ in einem Volumen ist gegeben mit

$$\langle q_i \rangle = \frac{1}{V} \int_V q_i \, dV. \quad (4.12)$$

Der Wärmestrom im diskreten Modell erfolgt ausschließlich über die thermischen Verbindungselemente und kann somit als Summe über alle Wärmeleitmodule N ausgedrückt werden

$$\langle q_i \rangle = \frac{1}{V} \sum_{p=1}^N q_i^p V^p = \frac{1}{V} \sum_{p=1}^N q_i^p A^p l^p. \quad (4.13)$$

Das Volumen wird hier ersatzweise durch die Querschnittsfläche A^p und die Länge des Verbindungselementes l^p beschrieben. Der Wärmestrom in einem Verbindungselement ist mit der Normalenrichtung n_i gegeben mit

$$q_i = \frac{Q \cdot n_i}{A}. \quad (4.14)$$

Die Wärmeleistung der Verbindung aus Gleichung (4.10) wird eingesetzt, sodass

$$q_i = \frac{\Delta T \cdot n_i}{\eta L A}. \quad (4.15)$$

Unter der Annahme, dass der Temperaturgradient im Körper $\partial T / \partial x_j$ auch auf die einzelnen Verbindungen angewendet werden kann, folgt die Temperaturdifferenz ΔT

$$\Delta T = L n_j \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (4.16)$$

Werden diese Gleichungen in (4.12) eingesetzt, folgt die Beschreibung des Wärmestroms in Abhängigkeit der lokalen Variablen

$$\langle q_i \rangle = - \left\{ \frac{1}{V} \sum_{p=1}^N \frac{l^p n_i^p n_j^p}{\eta} \right\} \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (4.17)$$

Der Vergleich mit Gleichung (4.2) liefert den Wärmeleitfähigkeitstensor der diskreten Formulierung

$$k_{ij} = \sum_{p=1}^N \frac{l^p n_i^p n_j^p}{\eta}. \quad (4.18)$$

Beton kann als ein thermisch isotropes Material aufgefasst werden, sodass ein Parameter k zur Beschreibung der Wärmeleitfähigkeit ausreichend ist. Damit gilt für ein konstantes η

$$k = \frac{1}{3} (k_{11} + k_{22} + k_{33}) = \frac{1}{3V\eta} \sum_{p=1}^N l^p. \quad (4.19)$$

Umgestellt nach η kann der Wärmewiderstand eines thermischen Verbindungselementes angegeben werden zu

$$\eta = \frac{1}{3Vk} \sum_{p=1}^N l^p. \quad (4.20)$$

4.1.2 Diskretisierung im Zeitbereich

Die Wärmespeicherung in einem Bauteil ist zeitveränderlich, sodass die zeitliche Diskretisierung der Energiebilanz (4.9) erforderlich ist. In Analogie zur expliziten Berechnung der Partikelpositionen in der DEM wird auch hier eine explizite Zeitdiskretisierung gewählt. Die Diskretisierung in der Zeit erfolgt mit dem expliziten Euler-Verfahren, sodass die Temperatur eines Partikels in jedem Zeitschritt n ausgewertet werden kann

$$T_{i,n+1} = T_{i,n} + \Delta t \cdot \frac{\sum_{j=1}^m k_{ij} \cdot (T_j - T_i)}{c_i \cdot m_i}. \quad (4.21)$$

Um eine stabile Berechnung zu gewährleisten darf die Zeitschrittweite einen Grenzwert nicht überschreiten. Wird ein einzelnes Partikel betrachtet und die Temperatur von null auf eine Temperatur T_1 erhöht, dann ist die aktualisierte Temperatur für den ersten Zeitschritt gegeben mit

$$T_{i,n+1} = T_{i,n} \cdot \left[1 - \Delta t \cdot \frac{\sum_{j=1}^m k_{ij}}{c_i \cdot m_i} \right]. \quad (4.22)$$

Wird die Zeitschrittweite Δt zu groß gewählt, kann es zu Oszillationen der Temperatur kommen, da der Klammerausdruck sowohl negative als auch positive Werte ergeben kann. Wenn nur positive Werte in der Klammer zugelassen werden sollen, kann dies mit der Bedingung

$$\Delta t < \frac{m \cdot c}{\sum_{j=1}^m k_{ij}} \quad (4.23)$$

erreicht werden. Die Gleichung beschreibt damit die obere Grenze der Zeitschrittweite. Bei Überschreitung dieses Grenzwertes, kann es zu Oszillationen des Vorzeichens kommen und es wird keine stabile Lösung erreicht.

An einem Beispiel mit fünf Partikeln wird dieser Zusammenhang verdeutlicht. Die Ausgangskonfiguration ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Die Randpartikel 1 und 5 bekommen eine feste Temperatur vorgegeben von 283 K bzw. 273 K. Die mittleren Partikel 2 – 4 können ihre Temperatur frei anpassen und haben einen Startwert von 273 K.

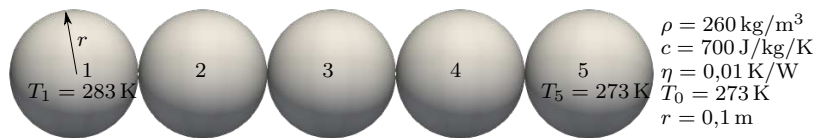


Abb. 4.2: Ausgangskonfiguration $t = 0$ für Zeitschrittweitenberechnung

Mit den angegebenen Materialparametern kann die maximale Zeitschrittweite nach (4.23) berechnet werden zu $\Delta t < 0,38$ s. Die Entwicklung der Temperatur des Partikels 2 in der Zeit für unterschiedliche Zeitschrittweiten ist Abbildung 4.3 zu entnehmen.

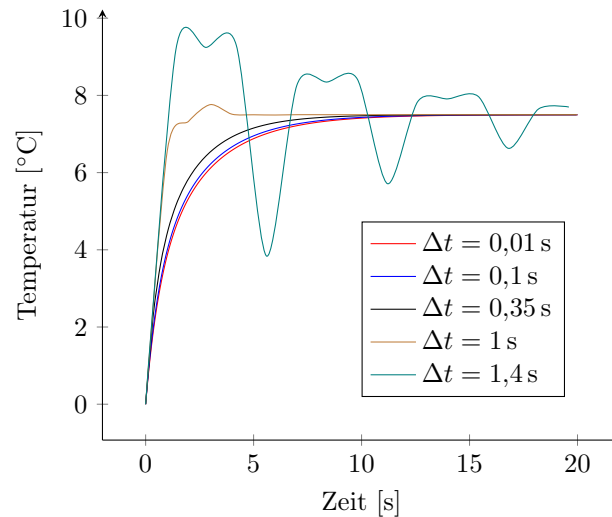


Abb. 4.3: Oszillation der Temperatur

Es zeigt, dass alle Lösungen gegen die stationäre Lösung von $7,5\text{ °C}$ konvergieren. Bei großen Zeitschrittweiten sind die zuvor beschriebenen Oszillationen im Temperaturverlauf zu erkennen. Physikalisch sinnvolle Ergebniswerte liefern nur die Berechnungen mit einer Zeitschrittweite von $\Delta t < 0,38$ s. Dies zeigt deutlich die Notwendigkeit der Festlegung eines Grenzwertes.

Je kleiner die Zeitschrittweite unterhalb des Grenzwertes gewählt wird, desto genauer werden die Ergebnisse im Zeitverlauf. Die Abweichungen sind allerdings verhältnismäßig gering. Auch wenn nur die stationäre Lösung von Interesse ist, sollte die Zeitschrittweite nicht über den Grenzwert angehoben werden, um die Konvergenz zu gewährleisten.

4.1.3 Programmablauf und Randbedingungen

Die Berechnung der Energiebilanz wird in den globalen Programmablauf nach Abbildung 2.5 integriert. Um die Erfassung von Kräften aus der Kopplungsbedingung zu gewährleisten, wird die Energiebilanz vor der Kontaktauswertung durchgeführt. Die (Aus-) Dehnungsgeschwindigkeiten können so im richtigen Zeitschritt erfasst werden.

Bei der Aufstellung der Energiebilanz werden die spezifischen Randbedingungen (RB) gesetzt. Unterschieden wird zwischen einer festen Temperatur, einer externen Wärmequelle bzw. -senke und einer Randbedingung für den konvektiven Wärmeübergang. Partikel mit einer fest vorgegebenem Temperatur werden nicht nach Gleichung (4.21) ak-

tualisiert, sondern in jedem Zeitschritt auf den vorgegebenen Wert gesetzt. Eine externe Wärmequelle wird in Gleichung (4.8) berücksichtigt.

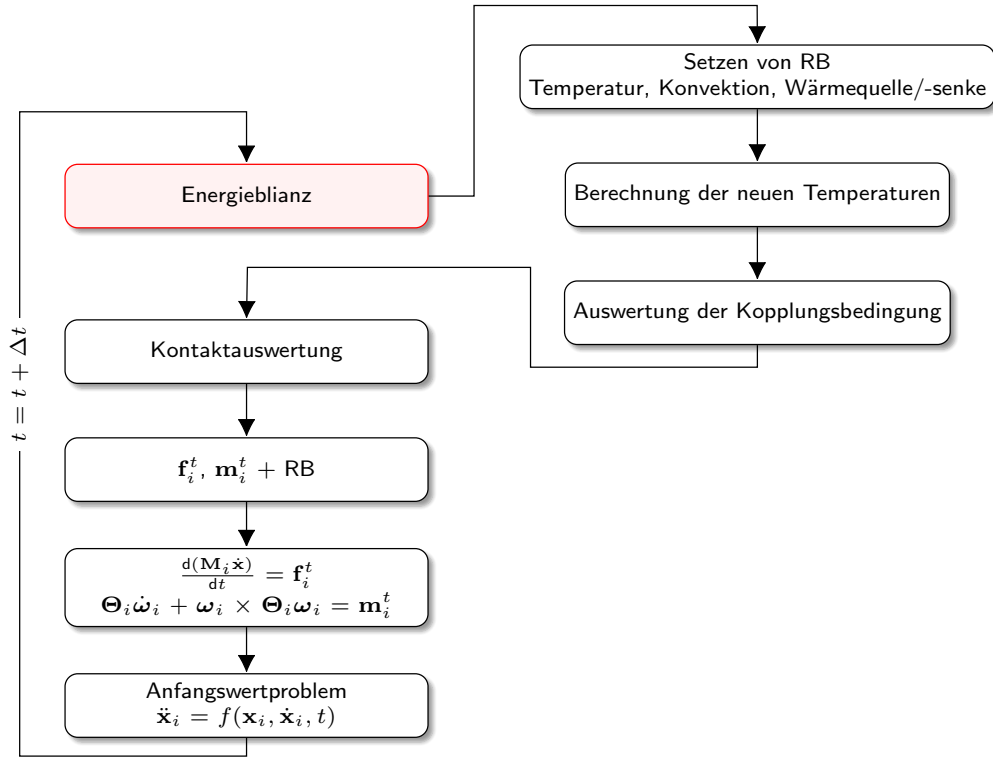


Abb. 4.4: Veränderter Programmablauf infolge Energiebilanz

Der konvektive Wärmeübergang ist bei der Beschreibung von Bauteilen in atmosphärischer Umgebung von Bedeutung. Über diese Art von Randbedingung kann ein Wärmeaustausch mit der Umgebung erfolgen. Der Wärmestrom zwischen einem Partikel und der Umgebung wird berechnet mit

$$Q_i^{conv} = -h^{conv} \cdot \bar{A}_i \cdot (T_\infty - T_{Partikel}). \quad (4.24)$$

Dabei stellt h^{conv} den Wärmeübergangskoeffizienten und T_∞ die Umgebungstemperatur dar. \bar{A}_i beschreibt den Anteil eines Partikels an der Oberfläche und dient zur Umrechnung des Wärmeübergangskoeffizienten als flächenbezogene Größe auf ein diskretes Partikel.

4.2 Validierung

Anhand mehrerer Beispiele wird das thermische Feld im Folgenden für stationäre und instationäre Prozesse validiert. Die Berechnung von stationären Zuständen ist mit einem direkten Gleichungslöser möglich, wenn die zeitlichen Änderungen des Temperaturfeldes verschwinden. Im Rahmen der DEM wird kein Gleichungssystem aufgebaut, sodass

immer eine Berechnung im Zeitbereich erforderlich ist, um die stationäre Lösung zu erreichen.

4.2.1 Wärmeleitung

Werden auf einen Würfel feste Temperaturreandbedingungen aufgegeben stellt sich asymptotisch nach langer Zeit eine stationäre Temperaturverteilung ein. Abbildung 4.5 zeigt eine zufällige Packung in Form eines Würfels mit einer stationären Temperaturverteilung. Trotz der heterogenen Mischung ist eine homogene Temperaturverteilung zu erkennen.

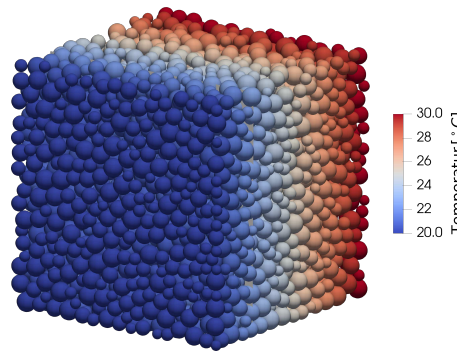


Abb. 4.5: Stationäre Temperaturverteilung in einem Würfel aus einer zufälligen Packung

Das folgende Validierungsbeispiel für ein instationäres Wärmeleitproblem ist eine zweidimensionale Scheibe, die mit einer Schicht Partikeln diskretisiert wird und in Abbildung 4.6 dargestellt ist.

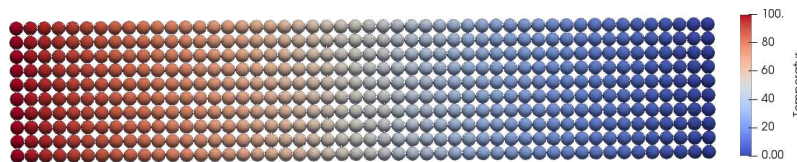


Abb. 4.6: Temperaturverteilung bei $t = 500000$ s

Ausgehend vom Startzustand $T_0 = 273$ K wird auf einer Seite eine Temperatur von $T_1 = 373$ K aufgebracht. Nach CRANK [17] gibt es für diesen Fall eine analytische Lösung der Form

$$\frac{T(x,t)}{T_1} = 1 - \frac{x}{\ell} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\kappa n^2 \pi^2 t}{\ell}} \left(\frac{\sin\left(\frac{n\pi x}{\ell}\right)}{n} \right) \quad (4.25)$$

mit der thermischen Diffusivität

$$\kappa = \frac{k}{\rho C_v} \quad . \quad (4.26)$$

Die Berechnung erfolgt für eine Wärmeleitfähigkeit $k = 1,6 \text{ W/(m K)}$, eine Dichte $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ und eine spezifische Wärmespeicherkapazität $C_v = 0,2 \text{ J/(kg K)}$. Die Dichte und die Wärmespeicherkapazität werden für das diskrete Modell übernommen. Der Wärmewiderstand der Wärmeleitmodule kann für die gewählte kubische Partikelanordnung in einer Ebene umgerechnet werden mit

$$\eta = \frac{1}{2k} \left(\frac{1-n}{\sum_{N_p} V_p} \right) \sum_{N_p} \ell_p. \quad (4.27)$$

Die Formel gilt für den zweidimensionalen Fall und ein Partikel und kann analog zu Gleichung (4.20) hergeleitet werden. n ist hier die Porosität der Packung, die für die kubische Packung $n = 1 - \pi/4$ beträgt. Der Radius der Partikel wird zu eins festgelegt, sodass der Wärmewiderstand für ein Partikel mit vier Kontakten mit

$$\eta = \frac{1}{2 \cdot 1,6} \left(\frac{1 - (1 - \pi/4)}{\pi^2} \right) \cdot 4 = 0,3125 \text{ K/W}$$

gegeben ist.

Ein Vergleich der analytischen mit der numerischen Lösung ist Bild 4.7 zu entnehmen. Bei der Berechnung der analytischen Lösung werden 200 Reihenglieder berücksichtigt. Die durchgezogenen Linien für die analytische Lösung und die numerischen Lösungen im Zentrum der Partikel sind in den Kurven eingezeichnet. Die Temperaturverteilung strebt einen linearen Verlauf an, welcher der stationären Lösung entspricht. Zu allen drei dargestellten Zeitpunkten ist die Übereinstimmung der Ergebnisse als sehr gut zu bezeichnen.

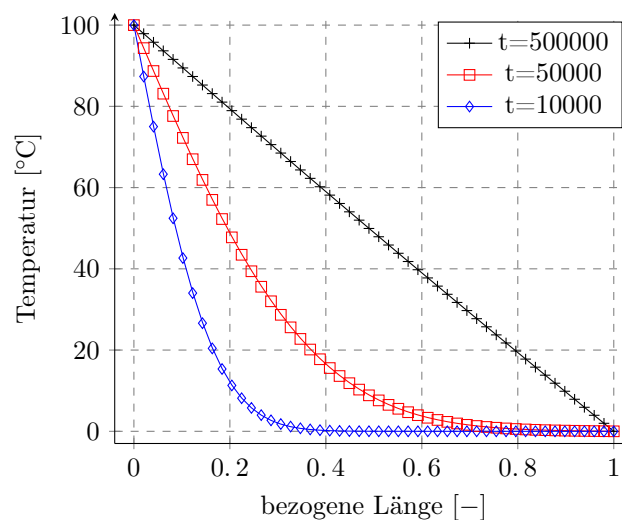


Abb. 4.7: Verlauf der Temperatur zu diskreten Zeitpunkten (analytisch und numerisch)

4.2.2 Wärmespeicherung

Der Vergleich mit einer FE-Berechnung zeigt die Übereinstimmung der zwei unterschiedlichen Berechnungsmethoden. Die Beschreibung des Berechnungsgebietes mit der FEM erfolgt mit isoparametrischen Elementen und linearen Ansätzen im Raum. Die Erwärmung eines Volumenkörpers kann auf ein diskretes Modell übertragen werden. Betrachtet wird ein Kontinuum mit einem Volumen von 8m^3 . Die gleichmäßige Erwärmung des Körpers kann unter Vernachlässigung der Wärmeleitfähigkeit berechnet werden mit

$$\Delta T = \frac{\Delta t \cdot Q}{m \cdot c} . \quad (4.28)$$

Im diskreten Modell müssen die Wärmeeinträge für jedes einzelne Partikel in Abhängigkeit der Partikelmasse zur Gesamtmasse wie folgt modelliert werden

$$Q_p = \frac{m_p}{m_{ges}} \cdot Q_{ges} . \quad (4.29)$$

Der Temperaturentwicklung für die gleichmäßige Erwärmung eines Kontinuums und einer Partikelpackung mit den Materialparametern aus Tabelle 4.1 ist in Abbildung 4.8 dargestellt und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung.

Tabelle 4.1: Parameter zur Validierung der Wärmespeicherung

Materialparameter	Formelzeichen	Einheit	Wert
Wärmespeicherkapazität	c	$[\frac{\text{W} \cdot \text{s}}{\text{kg} \cdot \text{K}}]$	10
Masse	m	$[\text{kg}]$	8000
Gesamtwärmeeintrag	Q	$[\text{W}]$	200
Zeitschrittweite	Δt	$[\text{s}]$	0,001

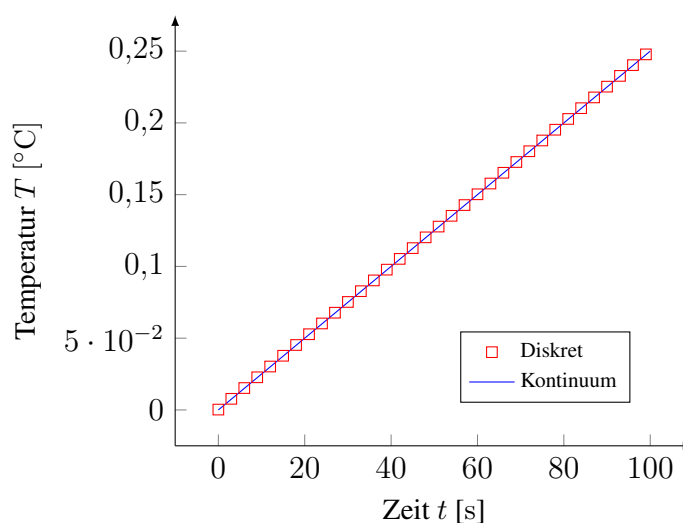


Abb. 4.8: Erwärmung von Kontinuum und Partikel

4.2.3 Konvektive Randbedingung

Als Validierungsbeispiel für die konvektiven Randbedingungen und die transiente Wärmeleitung wird das Beispiel 1 aus der DIN EN 1991-1-2/NA:2015-09 Anhang CC [2] gewählt. Die Beispiele in der Norm wurden mit dem Ziel entwickelt, die Vergleichbarkeit und Zuverlässigkeit von FE-Berechnungsergebnissen sicherzustellen. Im Folgenden erfolgt daher eine Anpassung für eine diskrete Modellierung.

Das Berechnungsgebiet wird durch eine quadratische Scheibe mit einer Kantenlänge von $\ell = 1 \text{ m}$ beschrieben und mit 441 Partikeln in einer Ebene abgebildet, die jeweils einen Radius von $r = 0,025 \text{ m}$ aufweisen. Die makroskopischen Größen $\lambda = 1 \text{ W/mK}$ und $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ müssen in das diskrete Modell übertragen werden. Für die korrekte Erfassung der Wärmemengen wird die Dichte der einzelnen Partikel auf die gegebene Dichte angepasst. Bei einem Kubikmeter Volumen muss die Masse von 1000 kg auf insgesamt 400 Partikel verteilt werden, da die Randpartikel nur jeweils zur Hälfte im Berechnungsgebiet liegen. Die Dichte für ein Partikel kann damit angegeben werden zu

$$\rho_P = \frac{1000 \text{ kg}}{400} \cdot \frac{1}{4/3\pi 0,025^3 \text{ m}^3} = 38197 \text{ kg/m}^3.$$

Der Wärmewiderstand der thermischen Verbindungen kann für das zweidimensionale Problem berechnet werden mit

$$\eta = \frac{1}{2 \cdot r \cdot \lambda} = 20 \text{ K/W}.$$

Die Randbedingungen sind in Abbildung 4.9a gegeben. Die konvektive Randbedingung wird anteilig entsprechend nach Gleichung (4.24) auf allen Partikeln auf dem unteren Rand angesetzt. Die anderen drei Ränder werden als adiabatisch betrachtet.

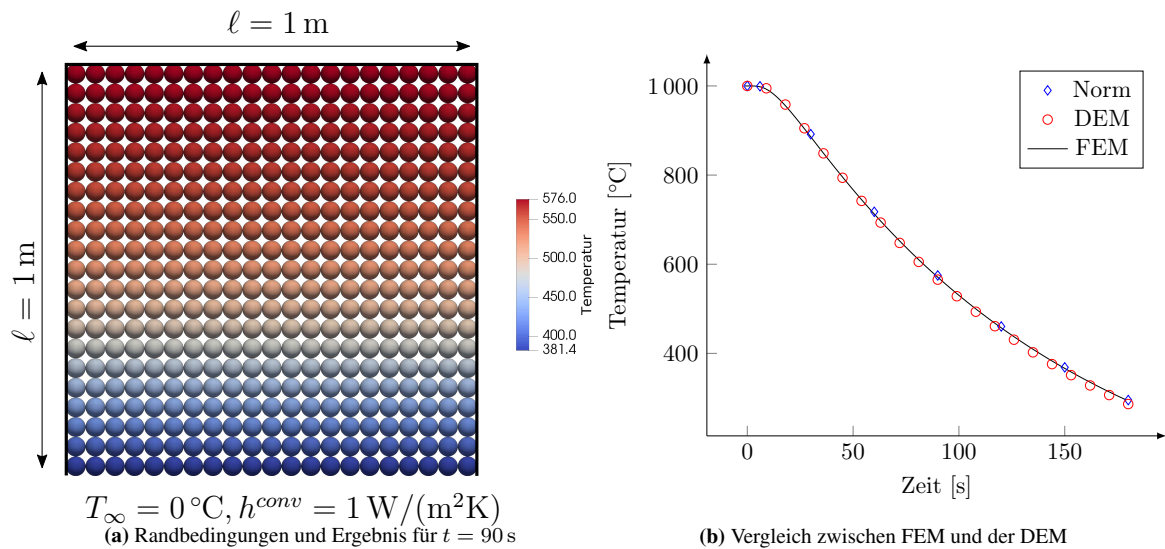


Abb. 4.9: Berechnung eines Abkühlprozesses

In der vorliegenden Version ist Wärmetransport nur über die thermischen Verbindungen möglich. Wird keine Randbedingung gesetzt, ist der Wärmefluss über den Rand identisch null. Die initiale Temperatur der Scheibe wird zu 1000 °C gesetzt und die Umgebungstemperatur beträgt konstant 0 °C. Die Berechnung wird für einen Zeitraum von 180 s durchgeführt.

Durch den offenen Rand erfolgt ein Wärmeaustausch mit der Umgebung, sodass sich ein eindimensionaler Wärmestrom beobachten lässt. Der Verlust an Wärmeenergie der unteren Partikel muss durch die umliegenden Partikel ausgeglichen werden. Dies betrifft auch nach einigen Sekunden die oberen Partikel.

Der Temperaturverlauf in Abbildung 4.9b zeigt die Änderung der Temperatur eines Partikels am oberen Rand im Vergleich mit einer FE-Berechnung und den Werten nach Norm. Die Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung.

4.3 Thermisch-mechanische Kopplung

Unter Temperatureinfluss treten im Kontinuum thermische Dehnungen auf, die mit dem Wärmeausdehnungskoeffizienten α_T und der Temperaturdifferenz ΔT berechnet werden können. Die Wärmedehnung kann wie folgt in das diskrete Modell integriert werden. Betrachtet werden die Änderungen der Radien der einzelnen Partikel, sodass gilt

$$\Delta r = \alpha_T \cdot r_0 \cdot \Delta T. \quad (4.30)$$

Der in diesem Fall mikroskopische Parameter α_T kann identisch zum Wert des dreidimensionalen Kontinuums angenommen werden. Der Parameter kann aber auch genutzt werden, um unterschiedliche Ausdehnungskoeffizienten innerhalb einer Packung zu untersuchen. ANDRÉ [4] untersucht beispielweise die Schädigung infolge ungleicher Ausdehnungskoeffizienten in einem 2-Phasen Material.

Die Änderungen der Radien müssen im Kontaktgesetz berücksichtigt werden. Die Ausdehnungsgeschwindigkeiten der Partikel

$$\dot{x}_{\Delta r} = \frac{\partial \Delta r}{\partial \Delta t}. \quad (4.31)$$

werden auf die lokale Geschwindigkeit der Partikel in Normalenrichtung addiert. Die Gleichung (2.6) wird diskretisiert zu

$$\Delta \delta_n = (\dot{x}_{rel,lo,n} + \dot{x}_{\Delta r}) \cdot \Delta t. \quad (4.32)$$

Die Auswertung der Kontaktkräfte erfolgt nach Gleichung (2.7). Die Geschwindigkeit der Ausdehnung hat demzufolge einen großen Einfluss auf die Größe der Kontaktkraft. Je langsamer die Belastung, desto kleiner werden die Kontaktkräfte.

Die Eignung des Modells hinsichtlich thermo-mechanischer Fragestellungen wird anhand verschiedener Beispiele untersucht. Betrachtet werden ein vollständig eingespannter sowie ein zwangungsfrei gelagerter Würfel. Als Einwirkung wird jeweils eine gleichmäßige Temperaturerhöhung aufgebracht.

4.3.1 Eingespannter Würfel

Die Auswirkungen der Kopplung auf den Spannungs-Dehnungszustand können an einem eingespannten Würfel gezeigt werden. Es werden unterschiedliche Konfigurationen und Randbedingungen untersucht.

Die nicht zugelassenen thermischen Verzerrungen im Würfel erzeugen einen hydrostatischen Spannungszustand, der mit

$$\varepsilon_x = \frac{1}{E}(\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)) + \alpha_T \Delta T \quad (4.33)$$

$$\varepsilon_y = \frac{1}{E}(\sigma_y - \nu(\sigma_x + \sigma_z)) + \alpha_T \Delta T \quad (4.34)$$

$$\varepsilon_z = \frac{1}{E}(\sigma_z - \nu(\sigma_x + \sigma_y)) + \alpha_T \Delta T \quad (4.35)$$

unter der Annahme, dass $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z = 0$ analytisch berechnet werden kann:

$$\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = -\alpha_T \Delta T \frac{E}{1 - 2\nu}. \quad (4.36)$$

Zunächst werden Würfel aus Einheitszellen verwendet, deren Materialparameter in Tabelle 4.2 gegeben sind.

Tabelle 4.2: Materialparameter

α_T	$1,2 \cdot 10^{-5}$	[1/K]
E	30000	[N/mm ²]
ν	0,2	[—]

Die Referenzlösung für eine Temperaturerhöhung um $\Delta T = 100$ K kann mit den gegebenen Eigenschaften des Materials bestimmt werden zu

$$\sigma_{ref} = 60 \text{ N/mm}^2. \quad (4.37)$$

Bei den folgenden Berechnungen werden die Beschleunigungen der Randpartikel zu null gesetzt. Die einwirkenden Kräfte auf die Randpartikel können als Lagerkräfte interpretiert werden. Die Summe aller Lagerkräfte auf einer Seitenfläche bezogen auf die Seitenfläche beschreibt die Spannungen im Würfel.

Die regelmäßigen Packungen in dichtester Packungslage können die analytische Lösung exakt abbilden. Der Spannungstensor

$$\sigma = \begin{bmatrix} -60,0 & 0,0 & 0,0 \\ 0,0 & -60,0 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & -60,0 \end{bmatrix} [\text{N/mm}^2]$$

zeigt einen isotropen triaxialen Spannungszustand, der anhand von Gleichung (2.21) bestimmt wird. Das Vorgehen kann auch auf die zufälligen Packungen übertragen werden. Im Unterschied zu den vorherigen Berechnungen müssen E und ν im Voraus bestimmt werden. Dies kann z. B. mit den in Kapitel 3.4 vorgestellten Verfahren erfolgen. Die Packung und die zugehörigen Materialparameter sind in der Abbildung 4.10 dargestellt.

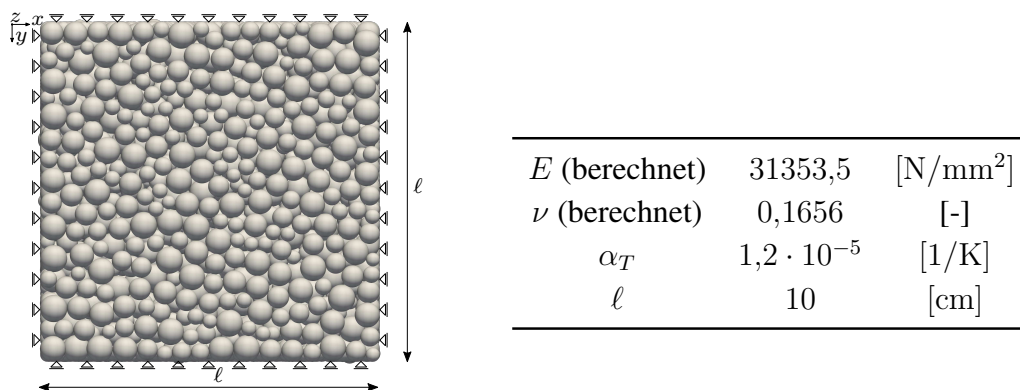


Abb. 4.10: Randbedingungen und zugehörige Parameter

Für das dargestellte Beispiel kann die Referenzlösung dem E-Modul und der Querdehnzahl entsprechend zu $\sigma_{ref} = 56,25 \text{ N/mm}^2$ angegeben werden. Die inneren Spannungen können mit Gleichung (2.21) im gesamten Gebiet berechnet werden und betragen

$$\sigma = \begin{bmatrix} -56,24 & 0,146 & 0,123 \\ 0,146 & -56,21 & 0,0443 \\ 0,123 & 0,0443 & -55,18 \end{bmatrix} [\text{N/mm}^2].$$

Die Packung zeigt ein isotropes Materialverhalten mit einer annähernd gleichmäßigen Spannungsverteilung in allen drei Raumrichtungen. Die Abweichungen der Normalspannungen zur Referenzlösung liegen im unteren einstelligen Prozentbereich. Aus der gleichmäßigen Wärmedehnung folgt ein nahezu schubfreier Spannungszustand. Im Spannungstensor sind geringe Abweichungen zu erkennen.

Als Alternative zu den festen Randbedingungen werden vor jede Seitenfläche des Würfels Wände so positioniert, dass die Verformungen vollständig verhindert werden. Die Spannungen im diskreten Modell werden anhand der Kräfte, die auf eine Wand wirken

berechnet. Auf den Würfel nach Abbildung 4.11 wird die zuvor beschriebene Temperaturdifferenz aufgebracht.

Die numerischen Lösungen sind abhängig von den gewählten Materialparametern, insbesondere von der Steifigkeit der Wandfedern. Die Steifigkeiten für den Kollisionskontakt eines Partikels mit der Wand müssen entsprechend hoch gewählt werden, um eine starre Wandscheibe abzubilden. Abbildung 4.12 verdeutlicht diesen Zusammenhang.

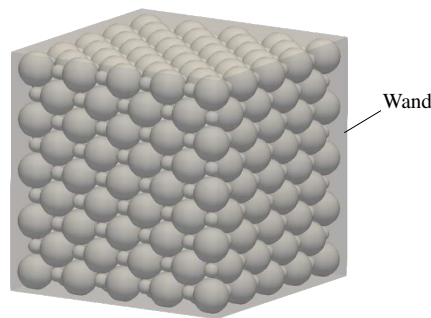


Abb. 4.11: Eingespannter Würfel mit Wänden

Es ist zu erkennen, dass die Spannungswerte gegen einen festen Endwert konvergieren. Die Steifigkeit k_n sollte daher $> 10^{11}$ N/m gewählt werden, um realistische Spannungswerte zu erhalten.

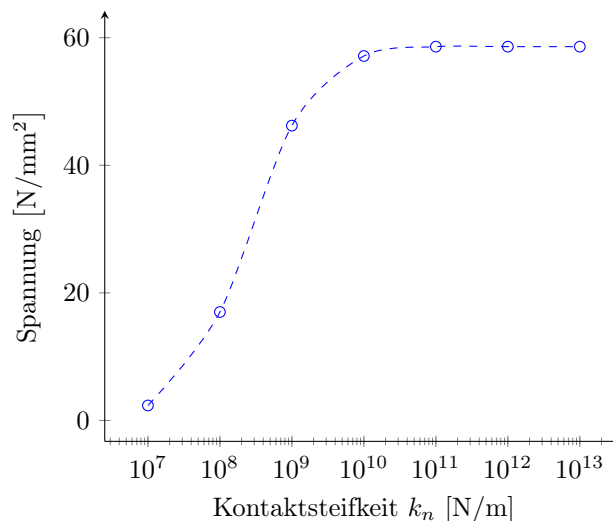


Abb. 4.12: Einfluss der Wandsteifigkeit auf die Einspannwirkung

4.3.2 Zwängungsfreie Lagerung

Wird ein Körper zwängungsfrei gelagert, muss er sich bei einer Temperaturerhöhung bzw. -erniedrigung dem materialspezifischen Wärmeausdehnungskoeffizienten entsprechend ver-

formen. Die analytische Lösung für einen Würfel mit der Kantenlänge 2 m kann für eine Temperaturdifferenz von $\Delta T = 1 \text{ K}$ angegeben werden zu

$$\begin{aligned} u_x = u_y = u_z &= \ell_0 \cdot \alpha_T \cdot \Delta T \\ &= 2\text{m} \cdot 0,0012\text{K}^{-1} \cdot 1\text{K} = 0,0024\text{m} . \end{aligned} \quad (4.38)$$

Die numerische Analyse mit einer Einheitszelle nach Tabelle 3.1 in Abbildung 4.13 zeigt, dass die analytische Lösung in allen drei Raumrichtungen exakt erfüllt wird. Die Verkleinerung des Volumens infolge einer Abkühlung ist hier nicht explizit gezeigt, da die Bilder identisch zu den gezeigten sind und lediglich ein anderes Vorzeichen aufweisen.

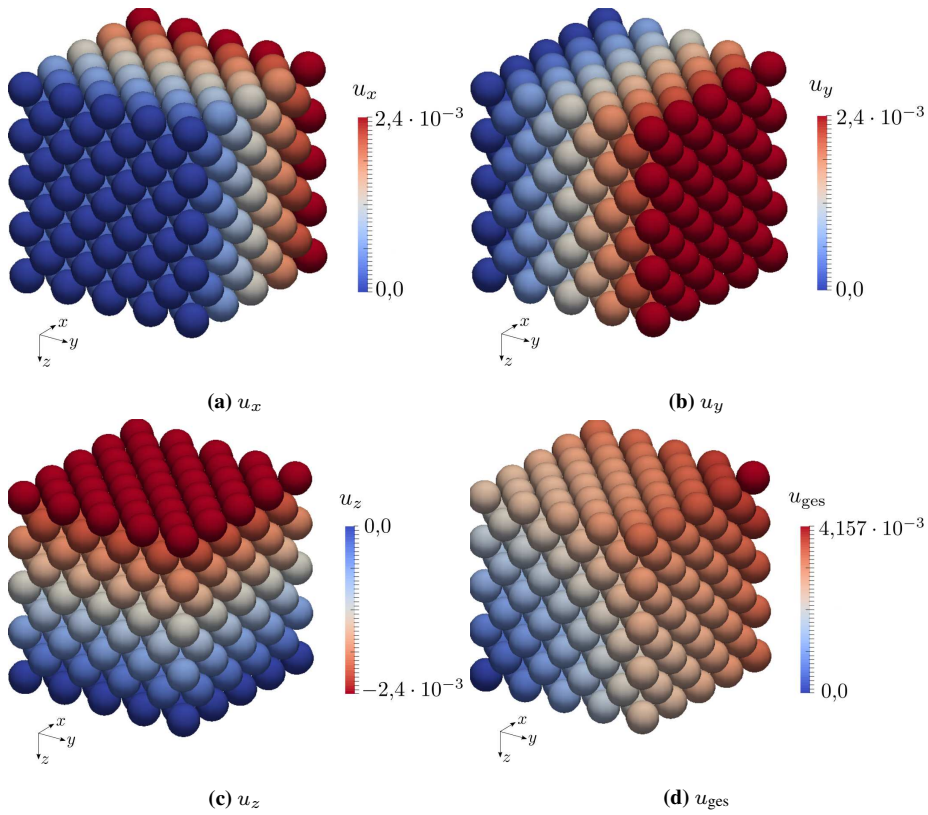


Abb. 4.13: Verschiebung eines zwangungsfrei gelagerten Würfels bei gleichmäßiger Erwärmung

Abbildung 4.14 zeigt die Entwicklung der Kontaktkräfte zwischen zwei Partikeln über die Zeit. Wenn sich die Partikel beginnen auszudehnen, kommt es aufgrund der Massenträgheit zur Ausbildung von Kontaktkräften. Mit der Zeit verschwinden die Kontaktkräfte. Der betrachtete Würfel ist damit zwangungsfrei.

Die Validierungsbeispiele zeigen insgesamt zufriedenstellende Ergebnisse. Das entwickelte Modell für die Energiebilanz und die Kopplung mit der Deformation kann damit für weiterführende Berechnungen verwendet werden.

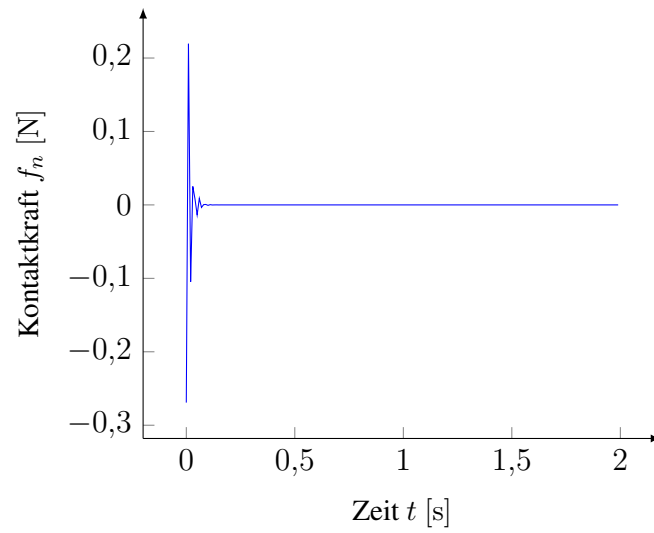


Abb. 4.14: Entwicklung der durchschnittlichen Kontaktkraft zwischen zwei Partikeln über die Zeit

5 Poren-Netzwerk-Modell

Die Poren-Struktur im Beton ist sehr komplex und es bedarf einiger Annahmen und Vereinfachungen, damit diese im diskreten Element Modell abgebildet werden kann. Wesentlich dabei ist die Betrachtung der unterschiedlichen Skalen. Die Porengröße im Beton erstreckt sich vom Mikrometer- bis Nanometerbereich. Soll ein poröses Medium auf dieser Ebene mit den zugehörigen Prozessen beschrieben werden, sind andere als die für die Theorie poröser Medien hergeleiteten Gleichungen notwendig. Mit der Beschreibung von Prozessen auf der Mikro- und Nanoebene können die makroskopischen Parameter, wie z. B. die Permeabilität bestimmt werden. Direkte numerische Simulationen des Strömungsverhaltens in der Porenstruktur können zur Bestimmung makroskopischer Größen genutzt werden. Die Berechnungen sind aber in der Regel mit einem hohen Rechenaufwand verbunden.

Poren-Netzwerk-Modelle werden für die Berechnung und die Charakterisierung poröser Medien schon seit Jahrzehnten verwendet. Zuerst vorgestellt von FATT [19] werden sie im industriellen Bereich zur Untersuchung des Gesteins in der Öl- und Gasförderung eingesetzt [5]. Aus den Bildern eines Mikrotomographen entwickelt PAUL [43] ein Poren-Netzwerk-Modell zur Bestimmung der Permeabilität einer porösen Schaumstruktur.

Die Beschreibung mit einem Poren-Netzwerk-Modell passt in das Konzept der vorgestellten diskreten Elemente Methode. In Analogie zur diskreten Abbildung der Massepunkte erfolgt hier eine diskrete Abbildung der Poren. Das Volumen der Poren eines porösen Mediums wird über die diskreten Punkte exakt abgebildet. Die einzelnen Poren sind über ein Netzwerk aus sogenannten *throats* verbunden. Diese Verbindungen sind für den Gas- bzw. Massetransport zuständig und haben per Definition kein Volumen.

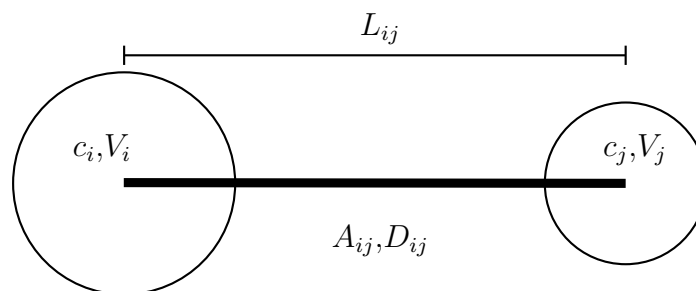


Abb. 5.1: Schema des Poren-Netzwerk-Modells

Die Transportmechanismen in den Kapillarporen des Betons richten sich unter anderem nach dem Sättigungsgrad der Poren. In einem vollkommen trockenen Medium findet ausschließlich Gastransport statt. Kommt es zu einem Feuchteeintrag in das Bauteil bildet sich an den Porenwänden eine Sorbatschicht. Die Wassermoleküle werden aufgrund von Adhäsionskräften an der Porenwand gehalten. Unter zunehmender Feuchtebelastung steigen auch die Schichtdicken der Wassermoleküle und es setzt parallel zum Gastransport

ein Flüssigkeitstransport ein. In einem vollständig gesättigten Medium erfolgt der Transport ausschließlich über Kapillarleitung.

Viele schädigende Prozesse können im Beton ohne Wasser nicht ablaufen. An dieser Stelle soll von einem vollständig gesättigten Material ausgegangen werden. Der Transport von gelösten Substanzen im Wasser kann als Diffusionsprozess mit dem zweiten Fickschen Gesetz beschrieben werden.

Die treibende Kraft innerhalb des Netzwerks zwischen zwei Poren ist dabei das Konzentrationsgefälle. Der diskrete Massetransport zwischen den Poren i und j wird mit

$$J_{ij} = -D_{ij}A_{ij}\frac{c_j - c_i}{L_{ij}} \quad (5.1)$$

beschrieben. Mit dem Diffusionskoeffizienten D_{ij} , der Querschnittsfläche eines Porenkanals A_{ij} und der Länge des Porenkanals L_{ij} kann die jeweilige Porenstruktur berücksichtigt werden. Die Änderung der Konzentration der Komponenten in einer diskreten Pore i kann angegeben werden zu

$$V_i \frac{dc_i}{dt} = \sum_j D_{ij}A_{ij}\frac{c_j - c_i}{L_{ij}}. \quad (5.2)$$

Es ist das gleiche Schema, wie bei der Berechnung der Wärmeleitung⁴ erkennbar. Die zeitliche Diskretisierung erfolgt analog mit einem expliziten Euler-Verfahren.

5.1 Modellierung des Porenraums

Die Poren im Beton sind hauptsächlich im Zementstein zu finden. Es wird an dieser Stelle davon ausgegangen, dass die Gesteinskörnung keine Poren aufweist und somit nicht am Flüssigkeits- bzw. Gastransport beteiligt ist. Die Porenstruktur ist unter anderem abhängig vom Hydratationsgrad, dem Wasser-Zement-Wert und eventuellen Zusatzstoffen. Im Abschnitt 3 wurde zur Reduzierung des numerischen Aufwandes auf die diskrete Darstellung des Zementsteins verzichtet. Die Eigenschaften des Zementsteins werden in den Kontaktbedingungen der Gesteinspartikel berücksichtigt. CHAREYRE [14] beschreibt den Fluss in einer Partikelpackung mit einem finite Volumen Ansatz auf der Grundlage einer radikalen VORONOI-Tessellation. Die radikale VORONOI-Tessellation ist für polydisperse Packungen gut geeignet, weil die Radien der Partikel als Wichtungsfaktoren verwendet werden. Die Packung wird in einzelne Zellen aufgeteilt, die jedes Partikel umgeben. Die Eckpunkte und Kanten der Zellen liegen durch die Radien der Partikel als Wichtungsfaktoren im freien Raum zwischen den Partikeln. In der Abbildung 5.2 sind zur Verdeutlichung drei Partikel mit unterschiedlichen Radien und dem dazugehörigen VORONOI-Diagramm dargestellt. Jeder Knotenpunkt des VORONOI-Diagramms wird als Porenpartikel interpretiert. Der Massetransport zwischen den einzelnen Partikeln erfolgt über die Kanten der VORONOI-Zellen.

Eine weitere Möglichkeit zur Erschließung des Porenraums ist die Nutzung von Bildverarbeitungstechniken, wie sie bei der Verarbeitung von Bildern eines Computertomographen zum Einsatz kommen. Das Verfahren ist aus der Medizin bekannt und kommt auch in der Betontechnologie zum Einsatz. Ein Überblick zu den aktuellen Einsatzmöglichkeiten gibt VICENTE [59]. Der Computertomograph (CT) liefert zweidimensionale Schichtaufnahmen, die mit geeigneten Algorithmen auf eine dreidimensionale Rekonstruktion der untersuchten Struktur führen.

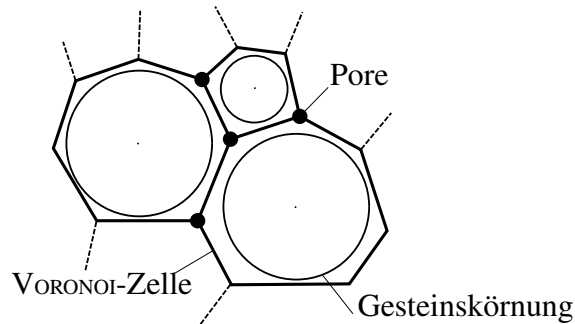


Abb. 5.2: VORONOI - Diagramm

Eine räumliche Darstellung des Rissverlaufs innerhalb der Struktur kann abgebildet werden. Die dreidimensional erzeugte Partikelpackung muss dazu in eine Voxel-Darstellung überführt werden. Das Gebiet wird dafür in eine dreidimensionale Gitterstruktur zerlegt, wobei ein Gitterelement als Voxel bezeichnet wird. Anhand der räumlichen Lage wird die Eigenschaft eines Voxels definiert, die in diesem Fall Porenraum oder Partikel bedeuten kann. Mit einem Segmentierungsalgorithmus [24] können Informationen über den Porenraum extrahiert werden. In der Abbildung 5.3 ist eine virtuelle Schichtaufnahme dargestellt, in der die Gesteinskörner eindeutig identifiziert werden können.

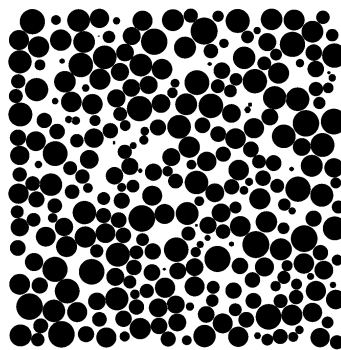


Abb. 5.3: Schichtaufnahme einer virtuellen Packung

Bei realen CT-Aufnahmen von Betonkörpern ist diese eindeutige Zuordnung schwieriger, da die Dichteunterschiede von Zementmatrix und Gesteinskörnung in der Regel sehr gering sind. Eine ausgewählte Packung und die extrahierten Poren sind in der Abbildung

5.4 dargestellt. Die Größe der Poren richtet sich nach dem tatsächlich vorhandenen Porenraum zwischen den Gesteinspartikeln und beschreibt daher nicht den wirklichen Porenraum. Für die Analyse einer realen Struktur ist dieses Verfahren jedoch sehr gut geeignet.

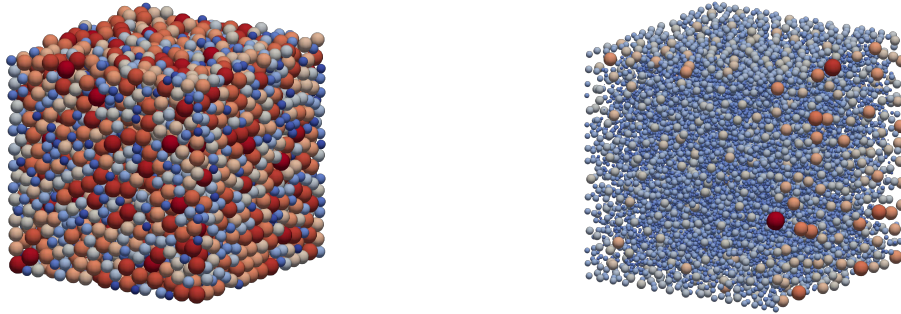


Abb. 5.4: Packung nach Abschnitt 3 (links) und extrahierte Poren (rechts)

Eine weitere Möglichkeit zur Erschließung des Porenraums wird von LE [33] vorgestellt. Diese Methode eignet sich für künstlich generierte Sieblinien und kommt ursprünglich aus der Stereologie. Von einem beliebigen Punkt A im Porenraum aus werden Strahlen erzeugt, die auf die umliegenden Partikel treffen. Die Idee ist in Abbildung 5.5 im zweidimensionalen veranschaulicht.

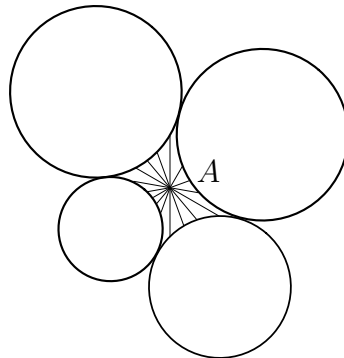


Abb. 5.5: Volumenmessung mit generierten Strahlen

Im dreidimensionalen Körper kann aus den Längen l_j aller Strahlen N vom Ausgangspunkt bis zum Schnittpunkt mit einem Partikel ein äquivalentes Volumen des Porenraums bestimmt werden

$$V_i = \frac{4\pi}{3N} \sum_{j=1}^N l_j^3. \quad (5.3)$$

Diese Methode eignet sich nur für sehr fein aufgelöste Strukturen auf der Mikroskala und darunter, die auch den wirklichen Porenraum beschreiben können. In dem vorliegenden Stand der Arbeit wird die Betonstruktur auf der Mesoskala untersucht und der Porenraum nur verschmiert abgebildet.

Für die Repräsentation des Porenraums wird im Rahmen dieser Arbeit daher eine statistische Verteilung der Poren gewählt. Die Lage der Poren wird über eine VORONOI-Tessellation definiert, welche die erforderlichen geometrischen Verknüpfungen liefert.

5.2 Randbedingungen

Das Setzen der Randbedingung für das Poren-Netzwerk erfolgt über ausgewählte Randporen. Aus der VORONOI-Tessellation werden alle auf den Außenflächen befindlichen Poren als Randporen definiert. Das gesamte Porenvolumen wird ausschließlich über die internen Porenpartikel abgebildet. Zeichnung 5.6 zeigt zweidimensional eine Ecke. Dargestellt sind die Festkörperpartikel mit den dazugehörigen VORONOI-Zellen. Die blau gekennzeichneten Porenpartikel liegen auf dem Rand und gehören zur Gruppe der Randporen; die grün gekennzeichneten zur Gruppe der internen Poren. Als Randbedingungen können der Druck oder die Konzentration einer bestimmten Spezies gesetzt werden.

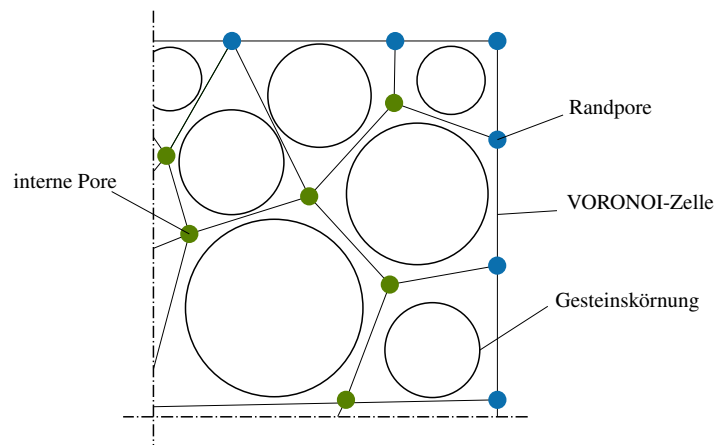


Abb. 5.6: Definition der internen Poren und Randporen

5.3 Porengrößen

Nach dem Erhärtungsprozess können die Poren im Beton klassifiziert werden. Die Gesamtporosität des Zementsteins setzt sich aus Gelporen, Kapillarporen, möglichen Luftporen sowie Verdichtungsporen zusammen. Die Kapillarporen bilden ein verzweigtes Netzwerk und sind hauptsächlich für den Transport von Flüssigkeiten und Gasen im Baustoff verantwortlich. Die Größe der Poren liegt zwischen 10^{-8} bis 10^{-5} m. Die viel kleineren Gelporen (10^{-9} bis 10^{-8} m) sind vorwiegend in den C-S-H-Phasen zu finden und haben keine Verbindung zum Kapillarporensystem. GONG [23] beschreibt ein empirisches Verfahren zur Abschätzung der Porenradienverteilung. Damit können schnell verschiedene Porenverteilungen mit definierten Eigenschaften erzeugt werden, ohne das dafür

Experimente erforderlich sind. Für die Berechnung von Sorptions- bzw. Desorptionsisothermen schlagen RANAIVOMANANA et al. [45] eine Porenradienverteilung aus drei Moden vor, vgl. Abbildung 5.7. Der erste Mode repräsentiert die Gelporen der C-S-H-Phasen, der zweite und dritte Mode die kleinen bzw. großen Kapillarporen.

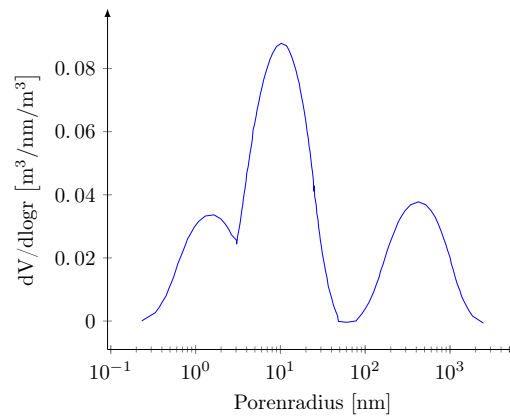


Abb. 5.7: Porenradienverteilung nach [45]

Die exakte Abbildung der Porenradien ist nur auf der Mikro- bzw. Nanoebene möglich. Auf der Mesoskala ist das Gesamtporenvolumen von Bedeutung, das aus der gewählten Porosität bestimmt werden kann und auf alle verfügbaren Poren aufgeteilt wird. Wie in der Abbildung 5.8 dargestellt, werden die Porenvolumina als annähernd normalverteilt angenommen.

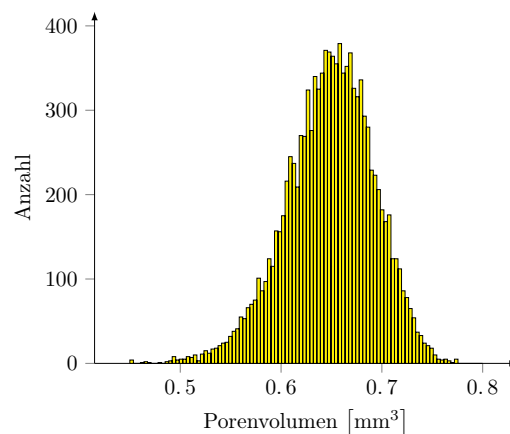


Abb. 5.8: Porenvolumen

Die Transporteigenschaften werden über die Verbindungen der Poren gesteuert und auf den jeweiligen Anwendungsfall abgestimmt.

5.4 Validierung

Das vorgestellte Poren-Netzwerk Modell wird anhand analytischer Beispiele validiert. Damit kann die Eignung hinsichtlich der Beschreibung von Transportprozessen im porösen Baustoff Beton abgesichert werden. Die Transportprozesse im Beton sind auf verschiedene physikalische Phänomene zurückzuführen. Während in einem vollständig gesättigten Medium der Feuchtetransport ausschließlich über Kapillarleitung erfolgt müssen bei teilweise gesättigten Medien zusätzlich die Dampfdiffusion betrachtet werden. Für Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit wird ausschließlich von vollständig gesättigten Probekörpern ausgegangen, sodass der diffusive Transport von gelösten Substanzen beschrieben werden kann.

5.4.1 Diffusionsprozesse

Die Diffusion beschreibt allgemein den Transport von Gasen, Flüssigkeiten und Festkörpern unter dem Einfluss eines Konzentrationsgradienten. Hier werden ausschließlich die Diffusion von Gasen und Flüssigkeiten behandelt. Die Mechanismen für die Diffusion eines Festkörpers sind nicht Gegenstand dieser Arbeit. Reine Diffusionsprozesse können mit dem zweiten Fickschen Gesetz der Form

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5.4)$$

beschrieben werden. Darin beschreibt C die gesuchte Konzentration an der Stelle x zum Zeitpunkt t für einen Diffusionskoeffizienten D . Für die parabolische, partielle Differentialgleichung kann eine analytische Lösung angegeben werden. Beispiele hierzu finden sich z. B. in [21]. Analog zu der Arbeit von WANG [62] wird im Folgenden der Eintrag von Chloriden in Beton als Validierungsbeispiel betrachtet. Die analytische Lösung für die eindimensionale Diffusion ist gegeben mit

$$C(x,t) = C_{s,0} \cdot \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4D(t-t_{ex})}} \right) \right), \quad x > 0, \quad t > t_{ex}. \quad (5.5)$$

Die Konzentration ist abhängig von der Stelle x , der Zeit t , der Ausgangskonzentration $C_{s,0}$, dem Diffusionskoeffizienten D sowie dem Zeitpunkt der ersten Einwirkung t_{ex} . Betrachtet wird eine quadratische Scheibe mit einer Kantenlänge von 60 mm. Wie in der Abbildung 5.9 zu erkennen wird auf der Oberseite eine feste Konzentration an Chlorid von $C_{s,0} = 4,86 \text{ kg/m}^3$ vorgegeben. Die Simulation wird für unterschiedlich feine Diskretisierungen durchgeführt. Die Parameter des Poren-Netzwerks müssen dafür angepasst werden. Der Diffusionskoeffizient wird konstant zu $D = 5,7408 \text{ m}^2/\text{d}$ angenommen. Die Querschnittsfläche A wird bei doppelter Anzahl an Poren auf ein Viertel reduziert. Die Konzentrationsprofile in Richtung des Konzentrationsgradienten aus der numerischen

Analyse und die analytische Lösung nach Gleichung (5.5) sind in Abbildung 5.10 dargestellt.

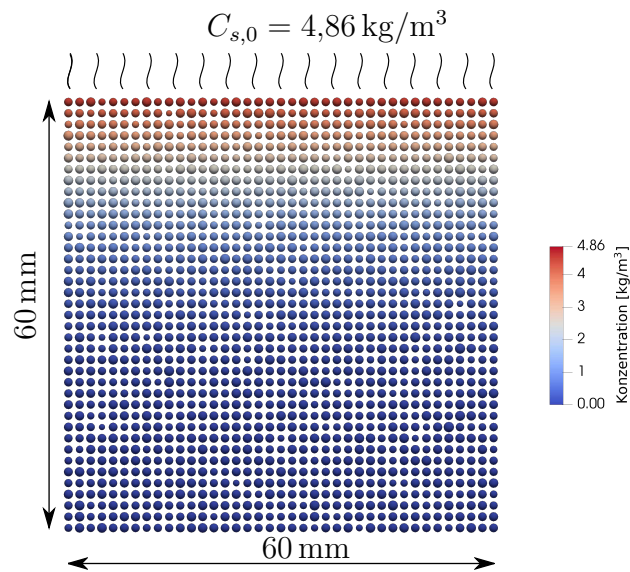


Abb. 5.9: Ergebnis nach 200 d

Die numerische Lösung ist jeweils an den einzelnen Poren bekannt und im Diagramm diskret gekennzeichnet. Alle Berechnungen sind in sehr guter Übereinstimmung mit der analytischen Lösung.

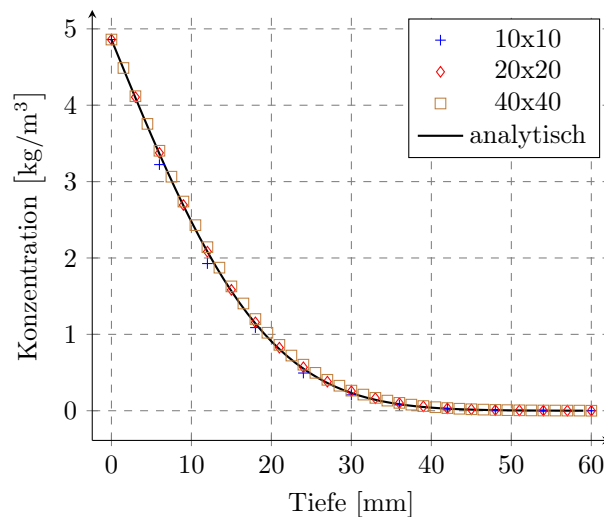


Abb. 5.10: Chlorid-Konzentrationsprofile nach 200 d

5.4.2 Stationäre Diffusion

Unter stationären Bedingungen stellt sich eine lineare Konzentrationsverteilung ein. Das Poren-Netzwerk muss diesen konstanten Fluss durch das Bauteil ebenfalls abbilden kön-

nen. An einem extrahierten Poren-Netzwerk wird an zwei Außenflächen eine konstante Konzentration vorgegeben. Die Konzentrationen der einzelnen Poren werden zu Beginn der Berechnung auf einen festen Startwert gesetzt und alle anderen Randflächen werden isoliert. Das Ergebnis einer stationären Berechnung ist in Abbildung 5.11 dargestellt. Der lineare Verlauf in x-Richtung ist deutlich erkennbar.

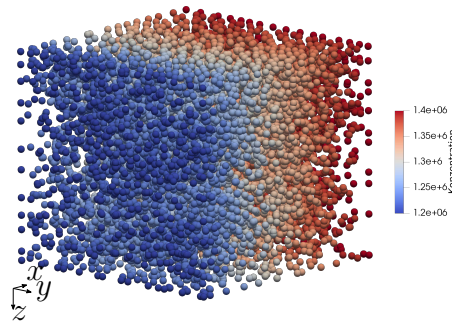


Abb. 5.11: Stationärer Fluss

5.5 Permeabilität

Das Poren-Netzwerk kann auch zur Bestimmung der Permeabilität einer Packung benutzt werden. Wird der Porenraum idealisiert modelliert, dann kann der Fluss durch die Poren-Verbindungen z. B. mit dem Gesetz nach HAGEN-POISEUILLE beschrieben werden. Unter der Annahme einer laminaren Strömung im Porenraum kann die Permeabilität des Bauteils mit dem Ansatz nach DARCY

$$Q = \frac{KA}{\mu L} \cdot \Delta P \quad (5.6)$$

berechnet werden. Die Umstellung nach der Unbekannten K liefert die Permeabilität

$$K = \frac{Q\mu L}{A\Delta P} \quad (5.7)$$

Mit der Festlegung einer definierten Druckdifferenz ΔP kann der Fluss auf dem Rand bestimmt werden. Bei einem Würfel beschreiben die Parameter L und A die Kantenlänge und die Seitenfläche des Würfels. Zur Berechnung des Permeabilitätstensors muss die Berechnung in allen Raumrichtungen wiederholt werden.

Die in diesem Modell erzeugten Poren-Verbindungen sind geometrisch nicht mit den realen Porenquerschnitt vergleichbar und auch in der Größe nicht passend. Für eine Abschätzung der Permeabilität wird das Vorgehen dennoch als zweckmäßig angesehen.

Das Poren-Netzwerk erlaubt die Modellierung verschiedener Szenarien. Ist die Oberfläche eines Betons sehr dicht, dann ist auch die Permeabilität gering. Dieses Phänomen kann mit der Anordnung von kleinen Oberflächenporen im Modell abgebildet werden.

5.6 Zeitschrittweite

In Analogie zu der Beschreibung der thermischen Zeitschrittweite in Gleichung 4.23 kann die maximale Zeitschrittweite für das Poren-Netzwerk angegeben werden mit

$$\Delta t < \frac{V_i}{\sum \frac{D_i \cdot A_i}{L_i}} . \quad (5.8)$$

Die erforderlichen Zeitschrittweiten für das Poren-Netzwerk sind vergleichsweise groß und liegen für normale Diffusionsprozesse im Stunden- bzw. Tagesbereich.

6 Chemische Reaktionen

Im Baustoff Beton sind chemische Reaktionen und Prozesse von grundlegender Bedeutung. Sowohl die Prozesse, die zur Festigkeit beitragen wie die Hydratation als auch degradierende Prozesse beruhen auf chemischen Reaktionen innerhalb des Betongefüges. Bei der Beschreibung von Alterungsprozessen ist die Erfassung und Beschreibung der beteiligten chemischen Reaktionen unerlässlich. In diesem Kapitel wird das grundsätzliche Konzept zur Berücksichtigung von chemischen Reaktionen in dem vorliegenden diskrete Elemente Modell erläutert. Wichtig ist, dass die meisten Reaktionen im Zementstein ablaufen. Entscheidend ist daher die gewählte Repräsentation des Zementsteins im Modell. Grundsätzlich können zwei unterschiedliche Modellierungsansätze verwendet werden.

Der erste Ansatz geht davon aus, dass Beton mit zwei unterschiedlichen Arten von Partikeln diskretisiert wird. Bis zu einer gewählten Größe beschreiben die Partikel die Gesteinskörnung und unterhalb des Grenzwertes den Zementstein. An jedem Partikel können beliebige Reaktionen definiert werden. Vorausgesetzt werden eine genaue Kenntnis der chemischen Zusammensetzung eines Partikels sowie der zugrunde liegenden Reaktionsgleichungen.

Mit der Unterteilung in die zwei Arten von Partikeln, ist auch eine räumliche Trennung der Reaktionen möglich.

Zur Reduzierung des numerischen Aufwandes wird im zweiten Ansatz auf die Zementpartikel verzichtet, wenn die Partikel ausschließlich die Gesteinskörnung repräsentieren. Mit einer VORONOI-Tessellation wird das Gebiet zusätzlich in einzelne Zellen zerlegt, wobei jedem Partikel genau eine Zelle zugeordnet ist. Das Konzept wird schematisch in Kapitel 6.4 vorgestellt.

Beide Modellansätze verfolgen das Ziel, beliebige Reaktionen zu berücksichtigen. Zur vollständigen Beschreibung einer chemischen Reaktion müssen die Konzentrationen der beteiligten Reaktanten sowie die Reaktionskinetik bekannt sein. Letztere ist unter anderem von den Milieubedingungen wie Temperatur und Feuchte abhängig. Die Geschwindigkeit einer chemischen Reaktion kann im Rahmen eines Experiments bestimmt werden.

Betrachtet wird eine allgemeine Reaktion vom Typ



in der die Edukte A und B zu den Produkten X und Y reagieren. Die Vorfaktoren v_i sind stöchiometrische Faktoren. Zusätzlich muss für die Energiebilanz die Reaktionsenthalpie ΔH_R berücksichtigt werden. Sie beschreibt den Anteil an Energie, die während der Reaktion freigesetzt oder hinzugefügt werden muss, damit die Reaktion abläuft. Erstere werden als exotherme und letztere als endotherme Reaktionen bezeichnet.

Eine Reaktion läuft solange ab wie Edukte vorhanden sind. Bei der Auswertung erfolgt eine Normierung auf das dominierende oder limitierende Substrat über die molare Masse,

sodass für jeden Zeitschritt die Änderungen der Substratmassen berechnet werden können. Beispielhaft durchgeführt für das Edukt A folgt

$$\frac{M(A)}{M(A)} + \frac{M(B)}{M(A)} \rightarrow \frac{M(X)}{M(A)} + \frac{M(Y)}{M(A)}. \quad (6.2)$$

Der Substratumsatz pro Zeitschritt wird unter der Berücksichtigung der Reaktionskinetik ausgewertet. Die Reaktionsgeschwindigkeiten variieren sehr stark. Während sie bei Explosionen im Millisekunden-Bereich liegen, vergehen bei langsamen Abbauprozessen mehrere Jahre.

6.1 Reaktionskinetik

Die Reaktionskinetik beschreibt unter anderem die Reaktionsgeschwindigkeit. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist von verschiedenen Faktoren, wie z. B. von der Temperatur und den Konzentrationen der beteiligten Substanzen abhängig. Die Reaktionsgeschwindigkeit v ist für eine Reaktion vom Typ (6.1) allgemein definiert als

$$v = -\frac{1}{v_A} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{v_B} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{v_X} \frac{d[X]}{dt} = \frac{1}{v_Y} \frac{d[Y]}{dt}. \quad (6.3)$$

Häufig wird die Änderung der Konzentration der einzelnen Reaktanten über die Zeit betrachtet. Der zeitliche Verlauf einer Reaktion ist von der Reaktionsordnung abhängig und in der Regel von den Konzentrationen der Edukte abhängig, sodass ein Geschwindigkeitsmodell der Form

$$v(t) = k \cdot c_A^{n_A} \cdot c_B^{n_B} \quad (6.4)$$

zugrunde gelegt werden kann. Die Ordnung der Reaktion bestimmt sich aus der Summe der Reaktionsordnungen der einzelnen Reaktanten $\sum n_i$. Die Formel (6.4) beschreibt demzufolge eine Reaktion 2. Ordnung.

Der Faktor k ist die Geschwindigkeitskonstante der Reaktion. Die Temperaturabhängigkeit einer Reaktion wird häufig mit der Arrheniusgleichung beschrieben, die mit

$$k = A \cdot e^{-E_A/(RT)} \quad (6.5)$$

definiert ist. Hierbei ist E_A die Aktivierungsenergie, A ein präexponentieller Faktor und R die universelle Gaskonstante.

6.2 Chemisch-thermische Kopplung

Wie zuvor beschrieben, ist die Geschwindigkeit einer Reaktion in den meisten Fällen von der Temperatur abhängig. Nach der Regel von VAN'T HOFF bewirkt eine Temperaturerhöhung um $\Delta T = 10 \text{ K}$ eine Verdopplung der Reaktionsgeschwindigkeit. Der Einfluss der chemischen Reaktionen auf den Wärmehaushalt muss ebenfalls berücksichtigt

werden. Läuft eine Reaktion exotherm ab, dann muss die freigesetzte Wärmeenergie als Wärmequelle berücksichtigt werden. Eine Wärmesenke wird folglich für eine endotherme Reaktion benötigt.

Damit sind die Grundprinzipien der chemisch-thermischen Kopplung bekannt. Die numerische Realisierung im Kontext der diskreten Elemente Methode kann auf die nachfolgend beschriebene Weise durchgeführt werden.

Mit der zusätzlich eingeführten Energiebilanz in Kapitel 4 kann der Einfluss der Temperatur auf die Reaktionsgeschwindigkeit direkt an jedem Partikel berücksichtigt werden. Die Reaktionsenthalpie einer Reaktion gibt Auskunft über die benötigte bzw. freigesetzte Wärmeenergie. Die Bestimmung erfolgt über die Differenz der Bindungsenthalpien der Produkte und Edukte

$$\Delta H_R = \sum \Delta H_{B,Produkte} - \sum \Delta H_{B,Edukte} . \quad (6.6)$$

Nach dem Satz von HESS ist die Reaktionsenthalpie unabhängig vom Reaktionsweg, sondern nur abhängig vom Anfangs- und Endzustand. Die Reaktionsenergie wird in [kJ/mol] berechnet, sodass über die Multiplikation mit dem bestimmten Stoffumsatz in [mol/s] die Wärmeenergie in [W] berücksichtigt werden kann.

6.3 Chemisches Gleichgewicht

Das chemische Gleichgewicht in einem realen System ist von vielen Faktoren abhängig. Die Stoffmengenänderung einzelner Reaktanten, die Temperatur und auch der Druck verändern das chemische Gleichgewicht, das mit einem geeigneten Programmsystem [32] neu berechnet werden kann. Die Kopplung an das in dieser Arbeit verwendete Programm ist für weitergehende Untersuchungen empfehlenswert. RAOOF [46] nutzt ein Modell von REGNIER [47] um komplexe Reaktionen/Prozesse in einem Poren-Netzwerk abzubilden.

In einem komplexen System mit vielen Reaktanten ist eine Vorhersage der Reaktionsreihenfolge nicht ohne weiteres möglich. Die Minimierung der freien Gibbschen Energie bietet die Möglichkeit aus einer Vielzahl an Reaktionen, die wahrscheinlichste zu bestimmen. Die Gibbsche Energie

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \quad (6.7)$$

ist ein thermodynamisches Potential und mit zwei Energiegrößen definiert. ΔS beschreibt hierbei die Änderung der Entropie des Systems bei einer isothermen Zustandsänderung und ΔH entspricht der oben eingeführten Reaktionsenthalpie, vgl. (6.6). Ist $\Delta G = 0$, so befindet sich das System im thermodynamischen Gleichgewicht. Bei Werten von $\Delta G < 0$ läuft die betrachtete Reaktion freiwillig ab. Umgekehrt sind bei Werten von $\Delta G > 0$ äußere Zwänge zum Ablaufen der Reaktion notwendig.

In dieser Arbeit werden nur solche Reaktionen betrachtet, deren Kinetik und Verlauf bekannt sind.

6.4 Numerische Realisierung

Wie bereits im Vorfeld erläutert, wird hier die zweite Möglichkeit der Berücksichtigung von chemischen Reaktionen im diskrete Elemente Modell vorgestellt. Die einzelnen Partikel werden als Gesteinskörnung interpretiert und von einer VORONOI-Zelle umhüllt (vgl. Abbildung 6.1).

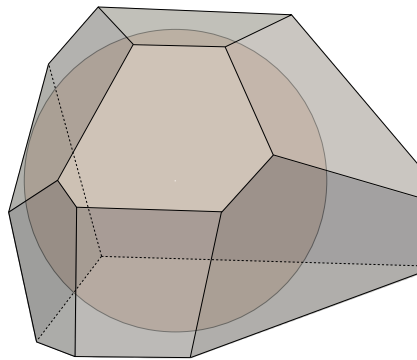


Abb. 6.1: Partikel mit zugehöriger VORONOI-Zelle

Alle Teilflächen die nicht auf der Außenseite der Struktur liegen, sind einem Kontakt mit einem benachbarten Partikel zugeordnet. Die Außenflächen können zur Definition von Randbedingungen genutzt werden.

Aus der Annahme, dass die Gesteinskörner vollständig im Zementstein eingebettet sind, folgt das Volumen des Zementsteins zu

$$V_{cs} = V_{vc} - V_p . \quad (6.8)$$

Die Dichte des Zementsteins ist unter anderem vom Hydratationsgrad abhängig und kann individuell gewählt werden. Ergänzend zur Masse der Gesteinskörnung wird die Masse des Zementsteins zur Gesamtmasse des jeweiligen Partikels addiert. Änderungen der Masse infolge chemischer Reaktionen sind direkt in der Änderung der Gesamtmasse sichtbar. Für die Erfassung und Berechnung chemischer Reaktionen wird eine virtuelle Prozesszone definiert, die sich jeweils zwischen zwei Partikeln befindet und in der Abbildung 6.2 rot eingefärbt zu erkennen ist. Die Darstellung erfolgt im Sinne der Übersichtlichkeit hier vereinfachend in zwei Dimensionen. Die Prozesszone dient als Bindeglied zwischen dem Festkörpermodell und dem Poren-Netzwerk-Modell. Auf Basis der geometrischen Lage werden jeder Prozesszone genau zwei Partikel mit dem dazugehörigen Festkörperkontakt, sowie die zur Kontaktfläche gehörenden Poren zugewiesen.

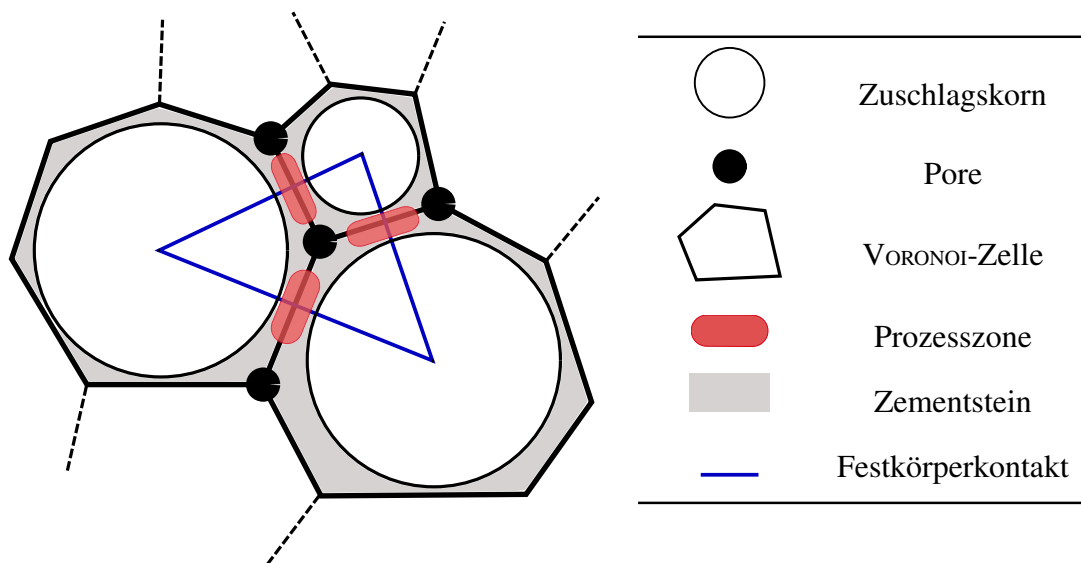


Abb. 6.2: Definition der Prozesszone

Exemplarisch sind zwei Partikel mit den zugehörigen VORONOI-Zellen in Abbildung 6.3 dargestellt, die aus einer Packung extrahiert wurden. Dort ist auch die Definition der Kontaktfläche zu erkennen. Der Abstand zwischen den Zellen wurde nur für eine bessere Übersicht eingefügt. Die orange und grün eingefärbten Flächen mit den gekennzeichneten Punkten $a - f$ sind deckungsgleich. Die Knotenpunkte repräsentieren auch im dreidimensionalen Raum diskrete Poren. Die in rot eingezeichnete Prozesszone ist ein virtuelles jedoch räumlich klar definiertes Objekt.

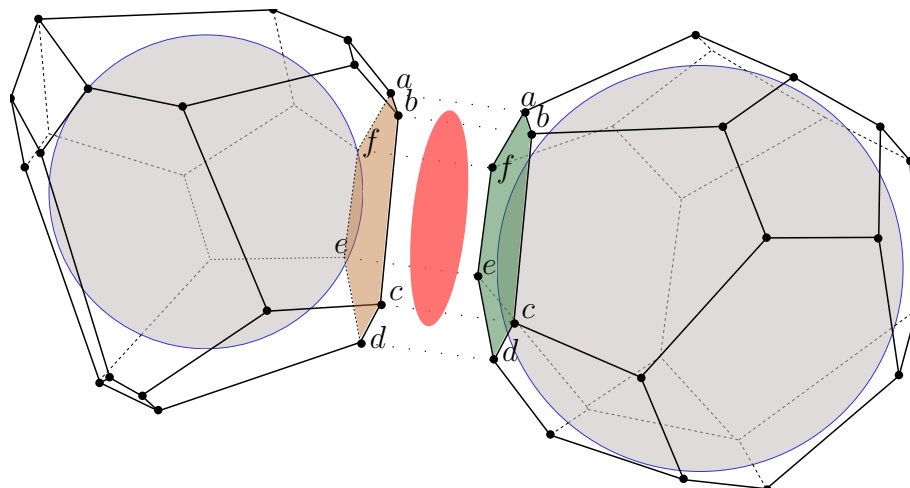


Abb. 6.3: Definition der Prozesszone im 3D-Modell

Jede Prozesszone bekommt in Abhängigkeit der Kontaktfläche einen fest definierten Anteil an Zementstein zugewiesen. Wird das linke Partikel als I und das rechte Partikel als

II bezeichnet, kann das Volumen der Prozesszone angegeben werden zu

$$V_{pc} = V_{vc,I} \cdot \frac{A_{a-f}}{A_{ges,I}} + V_{vc,II} \cdot \frac{A_{a-f}}{A_{ges,II}} . \quad (6.9)$$

An jedem Knotenpunkt $a - f$ sind die Konzentrationen einzelner Substanzen bekannt. In der Prozesszone werden die Konzentrationen aller angrenzenden Poren gemittelt und für die Auswertung der hinterlegten Reaktionsgleichungen verwendet. Die Änderungen in der Konzentration werden von der Prozesszone an die Poren zurückgeschrieben. Aufgrund der räumlichen Nähe der einzelnen Poren wird von einer nahezu identischen Konzentration ausgegangen, sodass die Mittelwertbildung als geeignete Näherung angesehen wird. Für eine genauere Auswertung bei stark unterschiedlichen Konzentrationen müssen Ansatzfunktionen hinterlegt werden, die eine Gewichtung der einzelnen Poren erlauben.

7 Anwendungsbeispiele

Das entwickelte Modell kann zur Berechnung verschiedener Szenarien genutzt werden. Allerdings wird die sehr hohe Komplexität vieler Prozesse von dem derzeitigen Entwicklungsstand des Modells noch nicht vollständig erfasst. Die Kopplungen zwischen dem thermischen, chemischen und mechanischen Feld werden anhand ausgewählter Beispiele gezeigt. Als Beispiel für die thermo-mechanische Kopplung wird der Brandfall gewählt, da im Bauteil aufgrund großer Temperaturgradienten, kritische Spannungszustände entstehen können. Die chemisch-thermische Kopplung wird anhand eines reduzierten Hydratationsmodells gezeigt. Der Sulfatangriff auf Beton ist als abschließendes Beispiel für eine chemisch-thermisch-mechanisch gekoppelte Berechnung dargestellt.

7.1 Brandfall

Der Brandfall ist für jeden Baustoff eine besondere Beanspruchungssituation. In den meisten Fällen ist die Struktur im Anschluss sehr stark degradiert. Die vielschichtigen Prozesse im Beton infolge Brandbelastung sollen hier nur kurz angesprochen werden. Bei einem Brand wirken in kurzer Zeit sehr hohe Temperaturen auf ein Bauteil ein. Dieser plötzliche Anstieg der Temperatur in der Umgebungsluft hat einen starken Temperaturgradienten im Bauteil zur Folge. Die Struktur des Betons bzw. des Zementsteins wird chemisch verändert und es kann zur Dehydratation kommen und zum Versagen des Bauteils führen. Eine Beschreibung der ablaufenden Degradationsprozesse liefert z. B. OSTERMANN [42]. Im Verlauf eines Brandereignisses kommt es häufig zu Abplatzungen der Betonoberfläche. FU und LI [22] geben eine gute Übersicht zum thermischen Abplatzen und unterscheiden in interne und externe Einflussfaktoren. Zu den internen Faktoren zählen unter anderem der Hydratationsgrad, die Festigkeit, die Permeabilität und der Feuchtigkeitsgehalt. Auch die Wahl der Gesteinskörnung hat maßgeblichen Einfluss auf das Verhalten im Brandfall. Unterschiedliche thermische Ausdehnungskoeffizienten und die thermische Beständigkeit sind hier zu nennen. Die Aufheizrate und die Brandraumtemperatur sind die wesentlichen externen Einflussfaktoren.

In der Literatur werden verschiedene Phänomene beschrieben, die zum Abplatzen einzelner Betonteile führen.

Eine Theorie geht von der Zunahme des Porendruckes aus, wie es KALIFA [28] beschreibt. Das im Beton enthaltene Wasser verdampft infolge der hohen Temperaturen und der Wasserdampf entweicht über die Poren des Betons nach außen. Ist die Permeabilität sehr gering, kann der Wasserdampf nicht entweichen und es entstehen hohe Drücke im Porensystem. Mit zunehmender Branddauer sind die äußeren Bereiche dehydratisiert und ausgetrocknet. Aufgrund des starken Temperaturgradienten gibt es im Inneren kältere Zonen, der Wasserdampf kann wieder kondensieren und es entsteht eine quasi-gesättigte Zone.

Diese Zone bildet eine Barriere und sorgt für einen erhöhten Anstieg des Porendruckes. Der Zusammenhang wird in Abbildung 7.1 veranschaulicht.

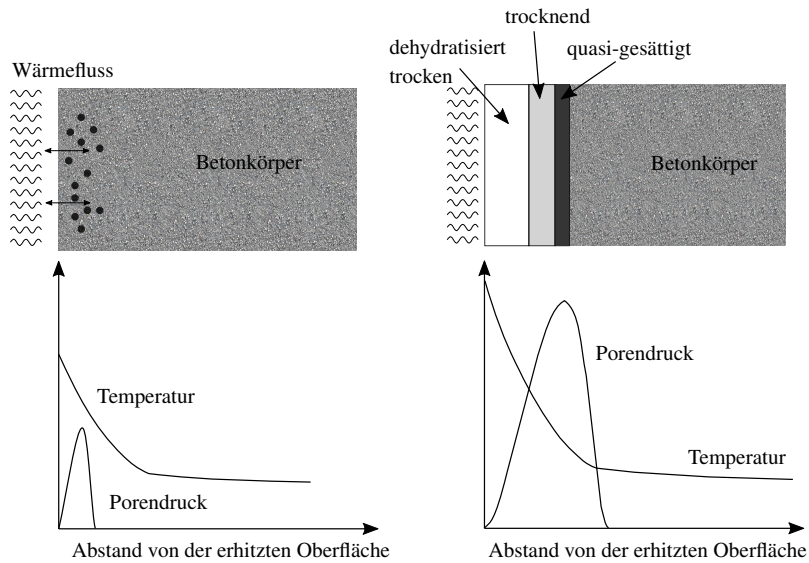


Abb. 7.1: Entwicklung des Porendrucks nach [28]

Ein weiterer Mechanismus beschreibt die thermischen Spannungen, die aufgrund des großen Temperaturgradienten im inneren des Bauteils entstehen. Infolgedessen kommt es in den Randbereichen zu großen Druckspannungen in Richtung des Randes, die nicht mit den Zugspannungen in den inneren Bereichen im Gleichgewicht stehen. Die beschriebenen Zusammenhänge sind schematisch in Abbildung 7.2 dargestellt.

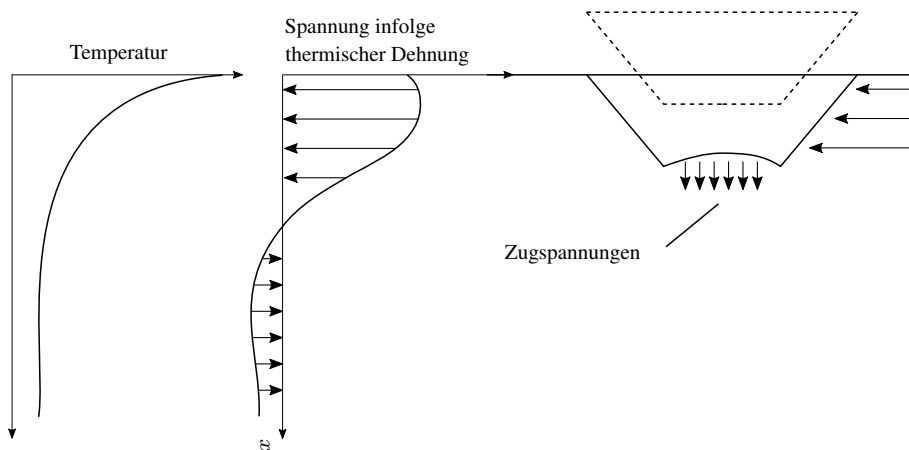


Abb. 7.2: Mechanismus des Abplatzens infolge thermischer Spannungen nach [7]

Die Einwirkungen auf ein Betonbauteil im Brandfall wird mit der Einheitstemperaturzeitkurve (ETK) vereinfachend beschrieben. Die ETK wird nach den derzeit gültigen Normen für die Heißbemessung eingesetzt. Der Funktionsverlauf für die Gastemperatur im Brandabschnitt ist in Abbildung 7.3 gegeben. Es ist zu erkennen, dass bereits nach

10 Minuten Temperaturen weit über 600 °C erreicht werden. Für den konvektiven Wärmeübergang auf das Bauteil soll laut DIN EN 1991-1-2 der Wärmeübergangskoeffizient zu $\alpha_c = 25 \text{ W/m}^2\text{K}$ angenommen werden.

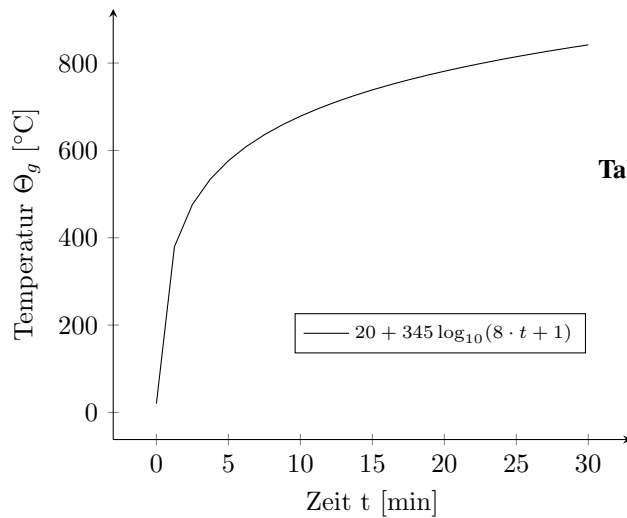


Tabelle 7.1: Materialparameter für Brandversuch

α_T	$1,2 \cdot 10^{-5}$	[1/K]
E	30000	[N/mm ²]
ν	0,2	[—]
c	879,0	[J/(kg · K)]
λ	1,85	[W/(m · K)]
ρ	2145,7	[kg/m ³]

Abb. 7.3: ETK nach DIN EN 1991-1-2

Vor der numerischen Analyse der thermo-mechanischen Prozesse wird eine thermisch-transiente Berechnung durchgeführt, um die Materialparameter zu kalibrieren. Eine FE-Berechnung mit dem kommerziellen Programm ANSYS® dient als Vergleich. In der Abbildung 7.4 sind die Temperaturverteilungen im Schnitt zum Zeitpunkt $t = 90 \text{ min}$ für einen Würfel der Kantenlänge $\ell = 0,3 \text{ m}$ dargestellt.

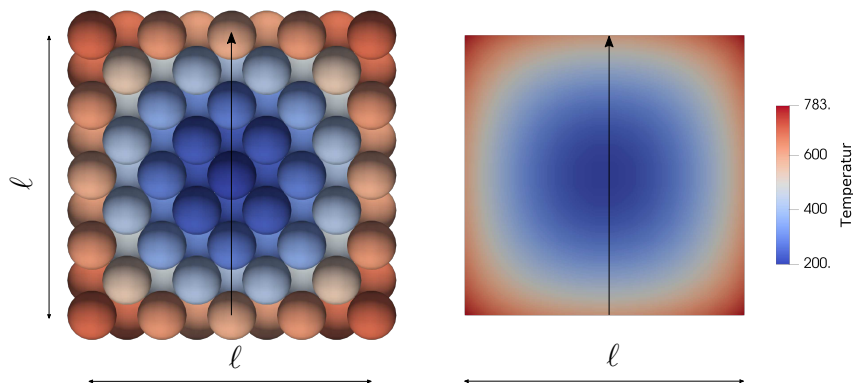


Abb. 7.4: Vergleich der Temperaturverteilung zwischen DEM und FEM

Der Wärmeeintrag erfolgt gleichmäßig von allen Seiten, sodass sich ein charakteristisches kreisförmiges Temperaturprofil ergibt. Die Ecken werden aufgrund der größeren Angriffsfläche schneller erwärmt. Beide Lösungen zeigen eine nahezu identische homogene Temperaturverteilung. Entlang des in der Abbildung mit einem Pfeil gekennzeichneten Pfades wird die Temperatur aufgetragen. In der DEM ist die Temperatur nur in den

Mittelpunkten der Partikel bekannt, sodass die Werte auf die Gerade interpoliert werden. Die dargestellten Temperaturverläufe in Abbildung 7.5 zeigen zu den zwei ausgewählten Zeitpunkten eine gute Übereinstimmung.

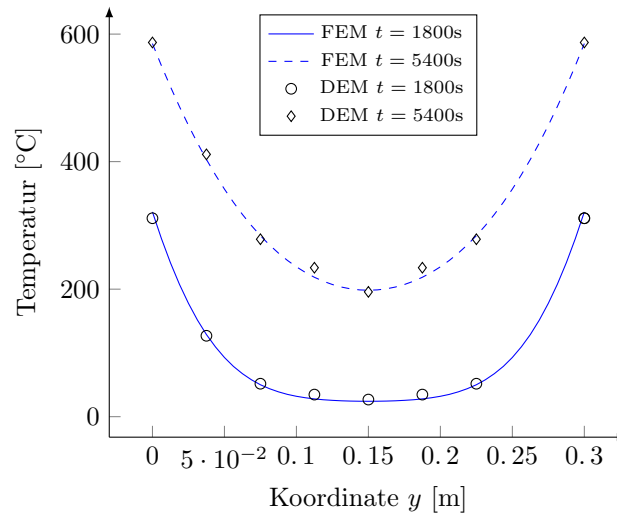


Abb. 7.5: Temperaturverlauf im Querschnitt für 4 Einheitszellen im Vergleich zur FEM

Im Vergleich zu einer regelmäßigen Packung, wird im Folgenden auch eine zufällige Packung untersucht. Der Querschnitt zeigt auch hier eine homogene Temperaturverteilung und ist gemeinsam mit der FEM-Lösung in der Abbildung 7.6 dargestellt. Der Wärmewiderstand der thermischen Verbindungselemente wird mit Gleichung (4.20) bestimmt.

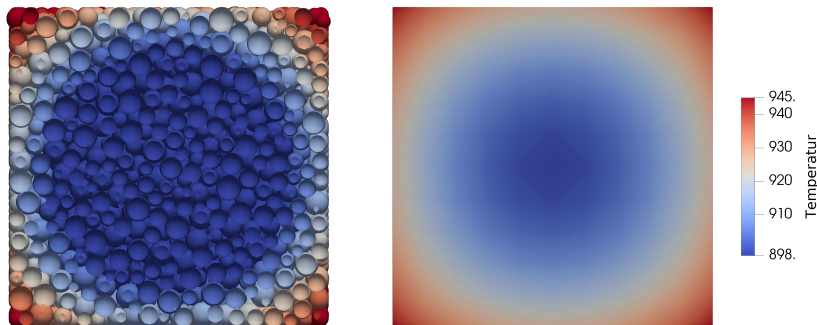


Abb. 7.6: Schnitt durch zufällige Packung und Schnitt durch FE-Ergebnis

Allerdings ist beim Vergleich der Bilder als auch der Temperaturprofile in Abbildung 7.7 eine leichte Überschätzung des Wärmewiderstandes zu erkennen. Aufgrund der hohen Anzahl der Partikel beträgt die Kantenlänge des Würfels hier $\ell = 10$ cm. Im Vergleich

zum vorherigen Beispiel sind die Temperaturen im Querschnitt deutlich höher. Der Gradient der Temperatur ist aufgrund der geringeren Abmessungen und damit verbundenen kürzeren Ausbreitungswege ebenfalls geringer.

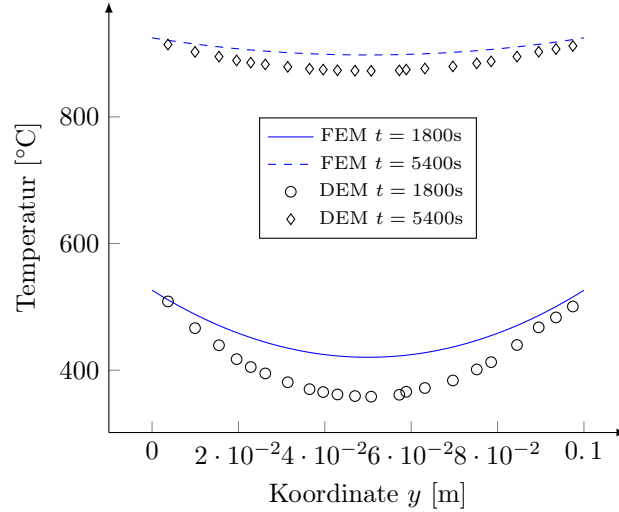


Abb. 7.7: Temperaturverlauf im Querschnitt für eine zufällige Packung

Die thermisch-mechanisch gekoppelte Analyse des Brandfalls ist infolge der erforderlichen kleinen Zeitschrittweiten nur in begrenztem zeitlichem Umfang möglich und wird daher an der regelmäßigen Packung gezeigt. Die zuvor beschriebenen Mechanismen des Abplatzens, können bei bestimmten Parametersätzen beobachtet werden. Die dargestellten Ergebnisse sind mit einem Wärmeeintrag von 100000 W pro Partikel auf den Außenflächen und einem Wärmewiderstand von $\eta = 1 \text{ W}/(\text{mK})$ berechnet. Die Parameter entsprechen nicht denen von Beton und einer normalen Brandbelastung. Aufgrund der benötigten kleinen Zeitschrittweite in der thermisch-mechanisch gekoppelten Berechnung werden diese Parameter zur schnellen Erzeugung eines Temperaturgradienten gewählt.

Die Abbildung 7.8 zeigt eine gleichmäßige Partikelpackung und ein Schnitt durch das Kontaktnetzwerk. Dargestellt sind die lokalen Verzerrungen in der Packung kurz bevor es zum Bruch kommt. Die Außenflächen stützen sich gegenseitig ab und stehen deshalb unter Druck. Zur Erfüllung des Gleichgewichts müssen im inneren Bereich Zugkräfte auftreten. Die Auswertung der Spannungen im gesamten Körper nach Gleichung (2.21)

$$\sigma = \begin{bmatrix} -3.59\text{e-}4 & 4.87\text{e-}6 & -1.11\text{e-}5 \\ -4.80\text{e-}6 & -3.59\text{e-}4 & 7.25\text{e-}6 \\ 9.49\text{e-}6 & -7.19\text{e-}6 & -3.60\text{e-}4 \end{bmatrix} \text{ N/mm}^2$$

zeigt, dass das interne Gleichgewicht erfüllt ist. In den Eckbereichen erreichen die lokalen Verzerrungen das Maximum. Dies ist auch der Grund dafür, dass die Ecken als ganze Einheit abplatzen. Die Einheitszelle zeigt aufgrund der geometrischen Anordnung ein

gleichmäßiges symmetrisches Verhalten. In allen Ecken werden die lokalen Verzerrungen daher nahezu gleichzeitig erreicht und es kommt zu Abplatzungen aller 8 Ecken des Würfels. Die Darstellung 7.9b zeigt das noch intakte Kontaktnetzwerk nach dem Bruch.

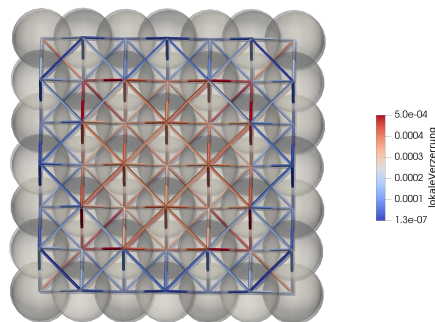
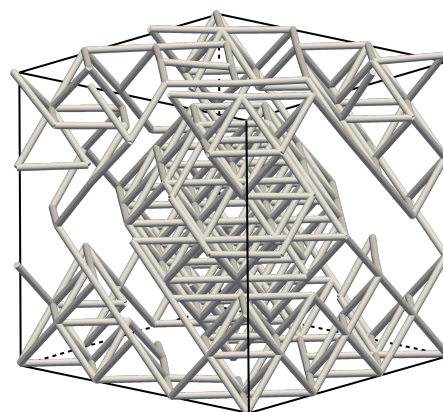


Abb. 7.8: Schnitt durch Partikelpackung vor dem Bruch

Zu erkennen sind die vom Betonkern abgetrennten Ecken. Die Ecken zeigen immer noch eine zusammenhängende Struktur auf. Im Experiment werden ähnliche Beobachtungen gemacht. Auf dem Bild 7.9a sind die abgeplatzten Ecken zu erkennen. Im Vergleich zur Simulation sind die Bruchstücke aufgrund der heterogenen Mischung nicht gleich groß.



(a) Experiment [22]



(b) Simulation

Abb. 7.9: Abplatzphänomen Ecken

Die dargestellten Ergebnisse zeigen den Einfluss der thermischen Verzerrungen auf das Abplatzverhalten. Ist die Aufheizrate gering und damit der Temperaturgradient klein, können keine Abplatzungen beobachtet werden.

7.2 Hydratation

Bei der Betrachtung der Hydratation im diskreten Elemente Modell werden folgende Annahmen getroffen. Aufgrund der sehr geringen realen Zement-Partikelgröße im Mikrometer-Bereich und der Gesteinskörnung im Zentimeter-Bereich ist es zweckmäßig die Zementpartikel zusammenzufassen. Im Folgenden sind die Zementpartikel als zusammenfassender Begriff zu verstehen. Die Kontaktsteifigkeiten zwischen den verschiedenen Partikeln müssen eigentlich im Zuge der Simulation ständig angepasst werden. Eine messbare Steifigkeit an realen Beton-Probekörpern ist erst ab einem Hydratationsgrad von ca. 0,3 – 0,4 vorhanden. Diese Entwicklung wird zur Zeit von dem vorliegenden Modell noch nicht erfasst. Häufig wird die Festigkeitsentwicklung im Zusammenhang mit dem Hydratationsgrad dargestellt, sodass auch im vorliegenden Modell eine Kopplung der Kontaktsteifigkeiten mit dem Hydratationsgrad denkbar ist.

Bei diesem Modellierungsansatz werden einzelne Partikel mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung betrachtet. Die Massenanteile können direkt aus den beteiligten Substraten berechnet und jedem Partikel individuell zugewiesen werden. Die gezielte Untersuchung von Fehlstellen oder ungewollten Konzentrationen und deren Auswirkungen ist mit dem numerischen Modell möglich.

7.2.1 Reaktion der Hauptklinkerphasen

Der Hydratationsprozess im Zement ist ein Vorgang, der viel Wärme freisetzen kann. Daher ist dieser Prozess auch gut geeignet um die Kopplung zwischen dem chemischen und dem thermischen Feld zu zeigen. Es werden nur die wesentlichen Reaktionen betrachtet. Dies sind im Einzelnen die Reaktion der vier Hauptklinkerphasen Tricalciumsilikat (C_3S), Dicalciumsilikat (C_2S), Tricalciumaluminat (C_3A) und Tricalciumaluminatferrit (C_4AF)

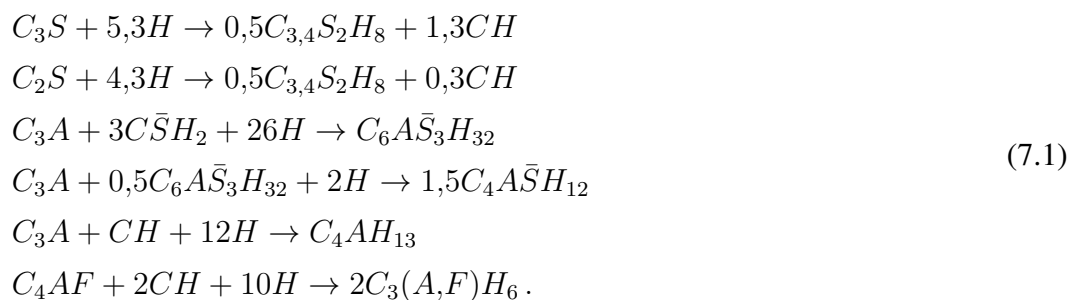
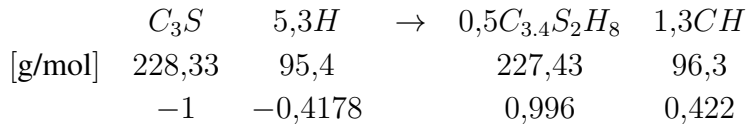


Tabelle 7.2: Abkürzungen in der Zementchemie

C	S	A	F	\bar{S}	H	M	Na	F
CaO	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	SO_3	H_2O	MgO	NaO	Fe_2O_3

Die allgemein üblichen Abkürzungen der Zementchemie sind in Tabelle 7.2 angegeben und werden, wenn nicht anders angegeben, verwendet.

Die Reaktionen werden nach dem Vorgehen aus Kapitel 6 für die numerische Realisierung aufbereitet. Die einzelnen Reaktionen werden jeweils auf die Hauptklinkerphase als limitierendes Substrat normiert. Daraus folgt für C_3S unter Berücksichtigung der molaren Massen



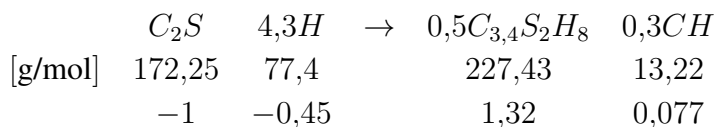
Die freigesetzte Wärmemenge wird aus den Standardbildungsenthalpien der beteiligten Edukte und Produkte berechnet. Eine umfassende Zusammenstellung von Standardbildungsenthalpien ist in [63] zu finden. In [34] und [9] gibt es eine spezialisierte Auswahl zu den Zementreaktionen. Je nach Quelle existieren für einzelne Substanzen unterschiedliche Werte, die auf die Bestimmungsmethodik zurückzuführen sind. Mit den Werten von BENTZ [9] wird die Enthalpie für C_3S zu

$$\begin{aligned}\Delta H_{C_3S} &= [-3283,0 + 1 \cdot 3 \cdot (-986,1)] - [-2927,82 + 5,3 \cdot (-286)] \\ &= -121,31 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

bestimmt. Daraus kann unter Berücksichtigung der molaren Masse die Wärmefreisetzung pro Masseneinheit Substrat berechnet werden zu

$$Q(C_3S) = \frac{\Delta H(C_3S)}{M(C_3S)} = -\frac{121,31 \cdot 10^3}{228,33} = -531,29 \frac{\text{J}}{\text{g}C_3S}.$$

Aus der Reaktionskinetik, die im Folgenden noch genauer beschrieben wird, kann der Substratumsatz pro Zeitschritt bestimmt werden, wobei die Wärmemenge als externe Quelle im Wärmehaushalt (4.9) berücksichtigt wird. Die übrigen Hauptklinkerphasen werden analog behandelt und können vollständig angegeben werden zu



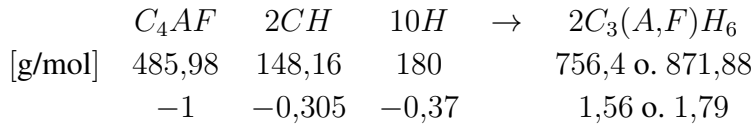
mit einer Enthalpie von

$$\Delta H_{C_2S} = [-3283,0 + 0,3(-986,1)] - [-2311,6 + 4,3(-286)] = -37,43 \text{ kJ/mol}$$

und der daraus resultierenden Wärmemenge

$$Q(C_2S) = \frac{\Delta H(C_2S)}{M(C_2S)} = -217,3 \frac{\text{J}}{\text{g}C_2S}$$

sowie



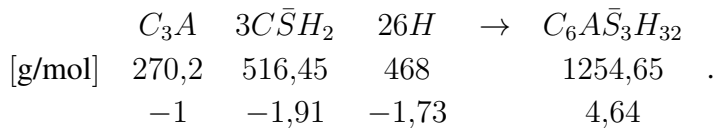
wobei die molare Masse des Endproduktes davon abhängt, ob Eisen oder Aluminium im Molekül eingebaut ist. Mit der Reaktionsenthalpie

$$\Delta H_{C_4AF} = [2(-5548)] - [-5090,3 + 2(-986,1) + 10(-286)] = -1173,5 \text{ kJ/mol}$$

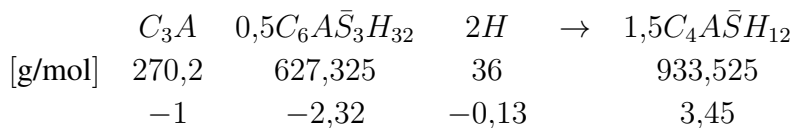
folgt die freigesetzte Wärmemenge zu

$$Q(C_4AF) = \frac{\Delta H_{C_4AF}}{M(C_4AF)} = -2414,7 \frac{\text{J}}{\text{g}C_4AF}.$$

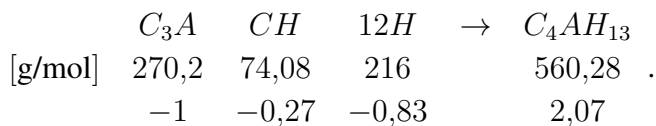
Die Wärmemenge differiert je nach verwendetem Ansatz und wird von MEINHARD [35] mit $420 \text{ J}/(\text{g}C_4AF)$ angesetzt. Die Umsetzung von Tricalciumaluminat läuft im Wesentlichen in drei Stufen ab. Zunächst reagiert C_3A bei Vorhandensein von Gips unter Bildung von Ettringit



Nach der vollständigen Umsetzung von Gips wird das gebildete Ettringit zu Monosulfoaluminat umgesetzt. Die Bildung von Ettringit aus Gips ist mit einer Volumenausdehnung verbunden, die aber aufgrund der noch nicht vorhandenen bzw. sehr geringen Festigkeit keine Rissbildung hervorruft. Ist der Beton erhärtet und kommt es infolge eines chemischen Angriffs zur Ettringitbildung, so kann daraus eine mechanische Schädigung des Gefüges erfolgen, vgl. Kapitel 7.3. Die Umsetzung zu Monosulfoaluminat



erfolgt bis zum vollständigen Verbrauch des Ettringit. Wenn dann immer noch C_3A als Reaktionspartner zur Verfügung steht, reagiert dieses mit dem Portlandit CH , dass in der Reaktion der anderen Hauptklinkerphasen gebildet wurde unter Bildung von Calciumaluminathydrat.



Die Reaktionsenthalpie für die Umsetzung von C_3A kann individuell für die drei Reaktionen bestimmt werden zu

$$\Delta H_{C_3A,1} = [-17539] - [-3587,8 + 3(-2022,6) + 26(-286)] = -447,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\Delta H_{C_3A,2} = [1,5(-8778)] - [-3587,8 + 0,5(-17539) + 2(-286)] = -237,7 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\Delta H_{C_3A,2} = [-8318] - [-3587,8 + (-986,1) + 12(-286)] = -312,1 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}.$$

Die eingetragene Wärmemenge in das System wird anhand eines Gesamtwertes für die Umsetzung von C_3A nach [35] zu

$$Q(C_3A) = 1340 \frac{\text{J}}{\text{g}C_3A}$$

festgelegt. Die Ermittlung des Hydratationsgrades erfolgt mit der im nächsten Kapitel beschriebenen Reaktionskinetik.

7.2.2 Reaktionskinetik

Das hier beschriebene Modell von MEINHARD und LACKNER [35] nutzt die Reaktionskinetik-Formulierungen von BERNARD [11]. Um den Hydratationsfortschritt anzugeben wird üblicherweise der Hydratationsgrad für jede Hauptklinkerphase definiert ($\xi_{C_3S}, \xi_{C_2S}, \xi_{C_3A}$ und ξ_{C_4AF} mit $0 \leq \xi_x \leq 1$). Die Reaktionskinetik wird hier nur in den Grundzügen wiedergegeben. Weitere Details finden sich in den angegebenen Literaturstellen. Die Hydratation kann in drei unterschiedliche Phasen eingeteilt werden, für die jeweils andere Gesetzmäßigkeiten gelten. Die Reaktionsrate $d\xi_x/dt$ wird über Wachstums- und Keimbildungsgesetzen mit der chemischen Affinität $\tilde{A}(\xi_x)$ verknüpft, welche als treibende Kraft der chemischen Reaktion gilt. Mit der Einführung eines Parameters τ_X , der die charakteristische Zeit jeder einzelnen Reaktion beschreibt, kann die dimensionslose Formulierung der Kinetik angegeben werden zu

$$\tau_X \frac{d\xi_x}{dt} = \tilde{A}(\xi_x). \quad (7.2)$$

Die erste Phase wird als Induktionsphase bezeichnet und beschreibt den Beginn der Hydratation in den ersten 2-3 Stunden. Die Zementteilchen beginnen sich im Wasser zu lösen und jede Klinkerphase erreicht einen bestimmten Hydratationsgrad $\xi_{X,0}$. Die benötigten Werte sind in [11] zu finden. In dieser ersten Phase wird eine konstante Reaktionsrate angenommen mit $\tilde{A} = 1$ und $\tau_X = \tau_{X,0} = t_{X,0}/\xi_{X,0}$. Die Zeit $t_{X,0}$ kennzeichnet den Endpunkt der Induktionsphase.

In der zweiten Phase kommt es zur Keimbildung und die Zementteilchen werden mit einer Hülle aus den Reaktionsprodukten umgeben. Sie wird daher auch als Nukleationsphase bezeichnet und läuft bis zu einem definierten Grenzwert $\xi = \xi_X^*$ ab. Diese Phase wird in der Zementchemie mit dem Avrami-Modell beschrieben

$$\xi_x = 1 + \xi_{x,0} - \exp[-a^\kappa] \quad (7.3)$$

und der zugehörigen Ableitung

$$\frac{d\xi_x}{dt} = \exp[-a^\kappa] \kappa a^{k-1} \frac{1}{\kappa \tau_0 \text{Arr}}$$

$$\text{mit } a = \frac{t - t_0}{\kappa \tau_0 \text{Arr}}$$

$$\text{Arr} = \exp\left[\frac{E_{ax}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right].$$

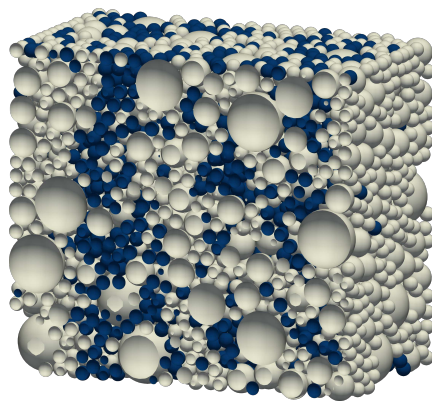
Ab dem Grenzwert ξ^* wird die Hydratation durch Diffusionsprozesse gesteuert. Für eine fortschreitende Reaktion müssen die erforderlichen Reaktionspartner durch die bereits entstandene Hydrathülle der Zementteilchen diffundieren, sodass diese Phase auch als Diffusionsphase bezeichnet wird. In [35] wird für diese Phase der Ansatz

$$\xi_x = 1 - \left(-\frac{\sqrt{2D(t - t_x^*)}}{r_p \sqrt{\text{Arr}} \sqrt{\Phi_0/\Phi}} \right)^3 \quad (7.4)$$

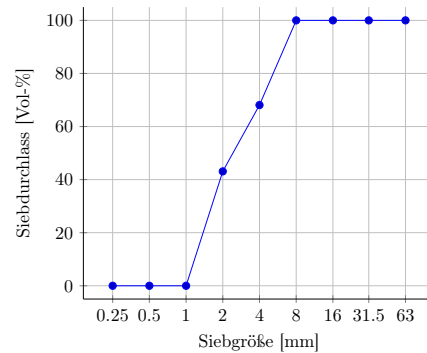
verwendet. Der darin enthaltene Diffusionskoeffizient ist abhängig vom Wasser-Zement-Wert und in [11] gegeben. Der Parameter r_p beschreibt die durchschnittliche Größe der Zementpartikel und $\Phi_0 = 3602 \text{ cm}^2/\text{g}$ ist die spezifische Oberfläche der Zementkörner, anhand derer die Parameter des kinetischen Modell bestimmt wurden.

7.2.3 Anwendungsbeispiel

Im oberen Abschnitt wurde bereits die grundsätzliche Modellierungsart mit Zement- und Zuschlagpartikeln beschrieben. Für die numerische Analyse wird ein Probekörper in der Form eines Würfels mit einer Kantenlänge von 5cm erstellt. Die Korngrößenverteilung ist in Abbildung 7.10b dargestellt.



(a) Materialverteilung



(b) Korngrößenverteilung

Abb. 7.10: Zusammensetzung und Eigenschaften des Probekörpers

Der Partikeldurchmesser wird nach unten auf 2 mm beschränkt und diese untere Grenze den Zementpartikeln als Größe zugewiesen. Die erhöhte Anzahl im Kornbereich von 1-2 mm ist auch in der Korngrößenverteilung zu erkennen. Die Zementpartikel sind in einem

Schnitt durch den Probekörper in Abbildung 7.10a blau gekennzeichnet. Bei der Erstellung werden die Zementpartikel zufällig unter die gesamten Partikel verteilt. Dadurch sind einzelne Bereiche mit einer Anhäufung an Zementpartikeln zu finden und andere Bereiche mit nur wenigen. Die Packungsdichte beträgt $\Phi = 0,64$ und ist damit vergleichbar mit den Ergebnissen in Abschnitt 3. Die chemische Zusammensetzung des Zements, vgl. Tabelle 7.3, wird auf die Zementpartikel übertragen, sodass an jedem Zementpartikel der genaue Gehalt der unterschiedlichen Zementanteile bekannt ist. Weitere Eingangsgrößen sind der Wasser-Zement-Wert und die Mahlfeinheit des Zements. In dieser Modellierungsvariante ist das Poren-Netzwerk noch nicht berücksichtigt, sodass die benötigte Menge an Wasser als vorhanden angenommen werden muss.

Tabelle 7.3: chemische Zusammensetzung der Zementpartikel

Komponente	C_3S	C_2S	C_3A	C_4AF	$C\bar{S}H_2$
m_x [Massen-%]	62,2	10,9	8,1	6,7	7,4

Der Gehalt einzelner Substrate in einem Partikel wird über die Zeit erfasst und kann in einem Diagramm dargestellt werden. In Abbildung 7.11 ist die Entwicklung der beteiligten Edukte und Produkte aus den Hydratationsreaktionen an einem Zementpartikel dargestellt.

Die zuvor beschriebene Charakteristik der Reaktionen ist in den dargestellten Verläufen gut zu erkennen. Das lokale Maximum in der Ettringit-Masse fällt mit dem Minimum in der Gips-Masse zusammen. Ab diesem Zeitpunkt wird wie bereits erwähnt das Ettringit zu Monosulfat umgesetzt, dessen Masse als ansteigend veranschaulicht wird.

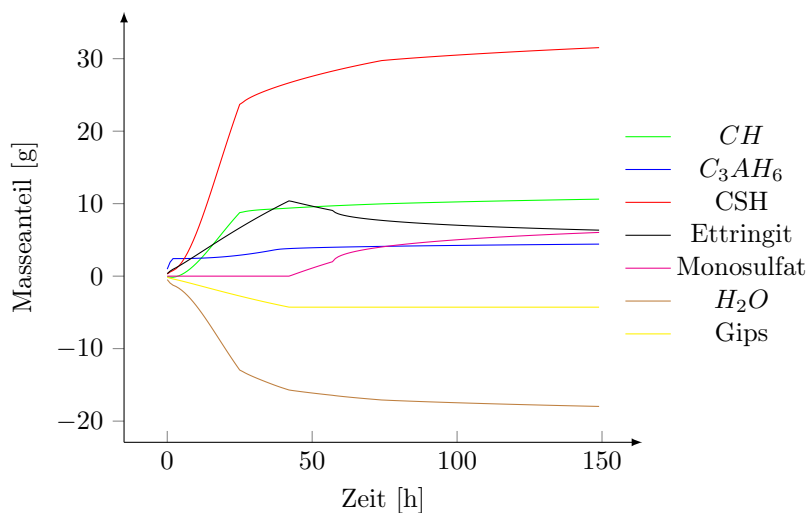


Abb. 7.11: Entwicklung der einzelnen Substrate in einem Zementpartikel

Aus den Verläufen kann auch die benötigte Wassermenge abgelesen werden, welche hier

als vorhanden angesetzt wird. Mit dem Poren-Netzwerk ist eine Beschreibung des Wassertransportes umsetzbar. Die Masse der festigkeitsbildenden C-S-H-Phasen steigt bereits zu einem frühen Zeitpunkt stark an und verflacht dann im weiteren Verlauf. Der abflachende Verlauf kann mit dem ebenfalls langsamer steigenden Hydrationsgrad der Zementsteinphasen begründet werden.

Die Hydratationsgrade der vier betrachteten Zementsteinphasen über die Zeit sind in Abbildung 7.12 dargestellt.

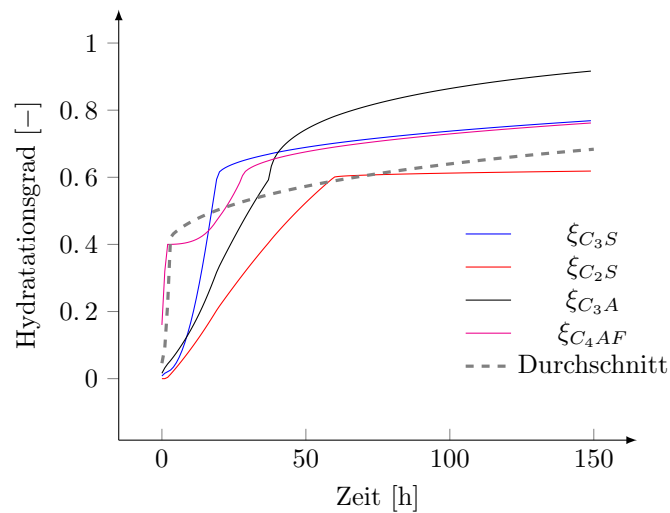


Abb. 7.12: Hydratationsgrad der Zementsteinphasen

Klar zu erkennen sind die drei zuvor beschriebenen Reaktionsphasen. Die Knicke in den Verläufen entstehen aufgrund der abschnittsweisen Definition. Die Zusammenfassung der Hydratationsgrade der einzelnen Zementsteinphasen, liefert den durchschnittlichen Verlauf des Hydratationsgrades.

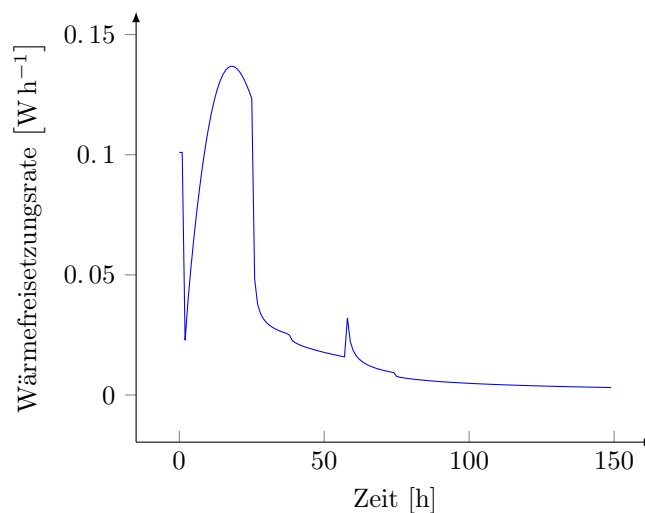


Abb. 7.13: Wärmefreisetzungsrate

Der theoretisch erreichbare Wert von $\xi = 1,0$ wird unter Umständen erst nach Jahren erreicht und auch nur unter Einhaltung der Regeln zur Nachbehandlung. In diesem Beispiel wird nach rund einer Woche ein durchschnittlicher Hydratationsgrad von 0,7 erreicht.

In Abbildung 7.13 ist die berechnete Wärmefreisetzungsrates über die Zeit dargestellt. Charakteristisch ist der Tiefpunkt nach der Induktionsphase mit der danach stark ansteigenden Rate auf das Maximum in der Nukleationsphase. Die erzeugte Wärme an einem Zementpartikel wird über die Wärmeleitung an die Zuschlagspartikel weitergegeben und verteilt sich so über den gesamten Querschnitt.

Im Experiment kann die Wärmefreisetzung mit einem Kalorimeter bestimmt werden. Bezogen auf die maximal mögliche Wärmefreisetzung $Q_\infty = 475\text{J/g}$ ist die Wärmefreisetzung aus dem Experiment nach [35] und die numerische Berechnung in Abbildung 7.14 dargestellt.

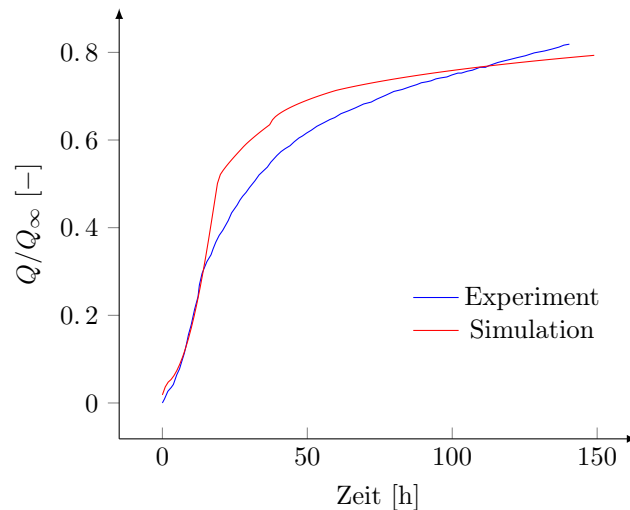


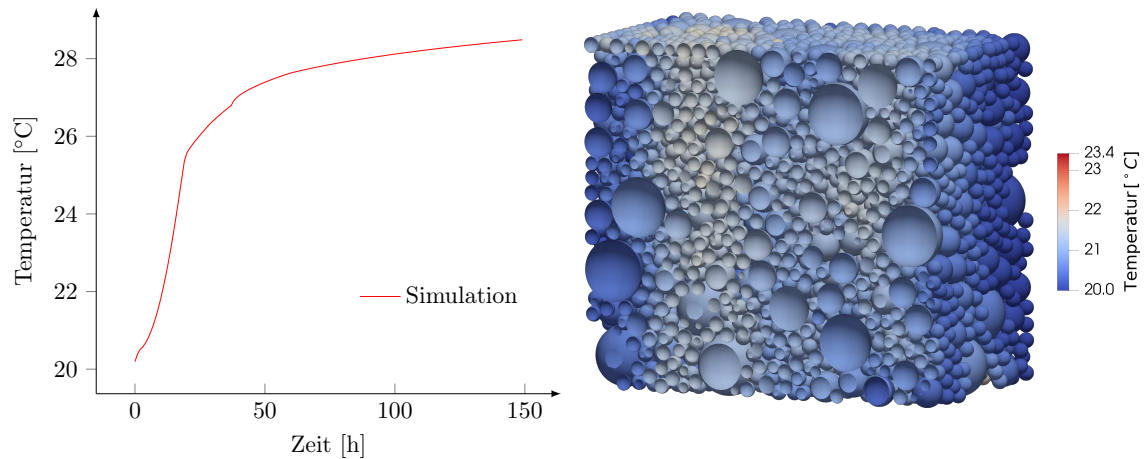
Abb. 7.14: Bezogener Wärmefluss

Die Simulation überschätzt in den ersten Tagen ein wenig die Wärmefreisetzung und unterschätzt sie ab einem Zeitpunkt von ungefähr $t = 120\text{ h}$. Die Übereinstimmung der beiden Kurven ist dennoch als gut einzustufen.

Die Temperaturentwicklung an einem Partikel richtet sich nach Art des Partikels und nach den gewählten Parametern. Abbildung 7.15a zeigt die Temperaturentwicklung über die Zeit an einem beliebig gewählten Zementpartikel. Die Temperatur steigt analog zum Wärmeeintrag nach Abbildung 7.14. In Abbildung ist die Temperaturverteilung im Querschnitt zum Zeitpunkt $t = 150\text{ h}$ dargestellt. Die Temperaturen sind ungleichmäßig verteilt. Die Wärmefreisetzung erfolgt nur an den Zementpartikeln und ein Vergleich mit Abbildung 7.10a zeigt, dass an den Stellen mit höheren Temperaturen auch die meisten Zementpartikel zu finden sind. Gleichzeitig ist aber auch eine Ausbreitung der Wärme auf die Partikel der Gesteinskörnung erkennbar.

Das Modell kann die Hydratation der vier Hauptklinkerphasen beschreiben. Die Änderungen der Gehalte verschiedener Substrate werden individuell an jedem Zementpartikel erfasst und die Wärmefreisetzung berechnet.

Die Größe und die räumliche Verteilung der Zementpartikel können mit erheblichem numerischen Aufwand an reale Strukturen angepasst werden. Die Änderungen der mechanischen Eigenschaften sind im gegenwärtigen Stand der Arbeit nicht enthalten und bedürfen weiterer Untersuchungen.



(a) Entwicklung der Temperatur an einem gewählten Zementpartikel

(b) Temperaturverteilung im Querschnitt nach 150 h

Abb. 7.15: Temperaturverläufe aus der Hydratationsberechnung

7.3 Sulfatangriff

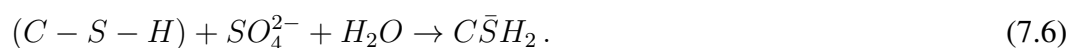
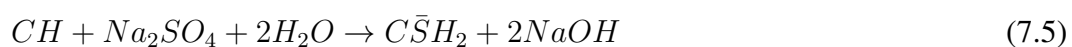
Der Einsatz von Beton in besonders beanspruchten Bereichen erfordert genaue Kenntnisse über die dort möglichen chemischen Prozesse. Im Bereich von Abwasseranlagen oder Gärbehältern für die Biogaserzeugung ist der Beton einer erhöhten Sulfatbelastung ausgesetzt. Der chemische Angriff von Sulfat auf den Beton kann zu einer Zerstörung der Struktur führen. Sind die verschiedenen Einflussfaktoren bekannt und vorhersagbar, können Prognosen erstellt und vorhandene Bauwerke bewertet werden.

Die Sulfationen greifen den Zementstein an und können sowohl einen lösenden als auch einen treibenden Angriff bewirken. Der lösende Angriff beschreibt die Zersetzung des Zementsteins infolge chemischer Reaktionen mit den angreifenden Ionen. Ein treibender Angriff liegt vor, wenn die Reaktionsprodukte ein größeres Volumen als die Edukte einnehmen. Diese Volumendehnung kann zur Rissbildung führen und das Eindringen weiterer schädlicher Substanzen ermöglichen. Je nach Stärke der angreifenden Substanz ist mit einer mehr oder minder starken mechanischen Degradation zu rechnen. Eine gute Übersicht der Schädigungsmechanismen geben STARK und WICHT [51].

Im folgenden wird der lösende Angriff von Sulfationen betrachtet. Die Calcium-Aluminat-Phasen des Zements reagieren mit den Sulfationen in der angreifenden Lösung. Im Berechnungsmodell wird der Zementstein in den Kontaktbedingungen berücksichtigt. Die ablaufenden Reaktionen sind in der Prozesszone, vgl. Kapitel 6 abgelegt und werden auch dort ausgewertet. Die Sulfationen werden in diesem Fall im gesättigten Medium transportiert. Die Transportprozesse werden mit dem Poren-Netzwerk nach Abschnitt 5 beschrieben. Die Zementsteinzusammensetzung wird zu Beginn der Berechnung festgelegt und ist damit an jedem Kontakt bekannt. Die Schädigung des Zementsteins kann infolgedessen individuell an jeder Kontaktstelle in Abhängigkeit der Sulfationenkonzentration berechnet werden.

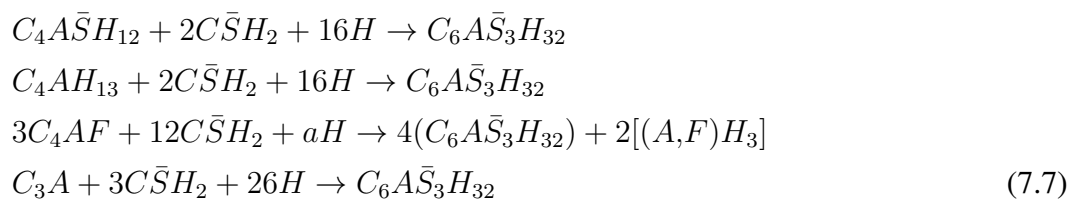
7.3.1 Reaktionskinetik

Für die Formulierung der chemischen Reaktionen werden an dieser Stelle die allgemein üblichen Bezeichnungen der Zementchemie nach Tabelle 7.2 verwendet. Die Sulfationen können sowohl mit Calciumhydroxid (CH) als auch mit den C-S-H-Phasen des Zements unter Bildung von Gips ($C\bar{S}H_2$) reagieren. Die C-S-H-Phasen sind maßgeblich für die Festigkeit(-entwicklung) verantwortlich. Die fein vernetzten nadelartigen Strukturen sorgen für eine gute Verzahnung. Die Reaktionsgleichungen für die Gipsbildung können z. B. nach [56], [55] angegeben werden zu



Die Gleichungen zeigen, dass ohne Wasser keine Reaktion ablaufen kann. In diesem Fall wird außerdem von Natriumsulfat als angreifender Substanz ausgegangen. Das Sulfation kann auch aus einer anderen Lösung, beispielsweise Magnesiumsulfatlösung stammen. Das grundsätzliche Wesen der Reaktion ändert sich dadurch aber nicht. Das Portlandit (alternative Bezeichnung für Calciumhydroxid) muss zuerst in Lösung gehen, bevor es mit den gelösten Sulfationen zu Gips reagiert. Die zweite Reaktion beschreibt den lösenden Angriff auf die (C-S-H)-Phasen.

Im Zementstein sind Calciumaluminat vorhanden, die mit dem Gips unter Bildung von Ettringit reagieren können. Namentlich sind das Monosulfoaluminat $C_4A\bar{S}H_{12}$, Tetracalciumaluminathydrat C_4AH_{13} , Tetracalciumaluminatferrit C_4AF sowie unhydratisiertes Tricalciumaluminat C_3A . Die Reaktionen können nach [26] angegeben werden zu

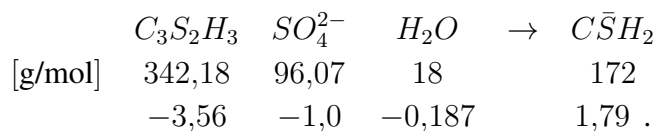


IDIART [26] schlägt ebenso eine Zusammenfassung der einzelnen Reaktionen unter Berücksichtigung eines Wichtungsfaktors vor. Damit können mit Reaktionen beschrieben werden mit



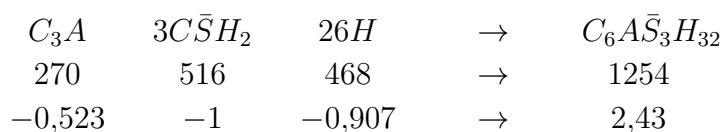
wobei $c_{eq} = \gamma_1 C_4A\bar{S}H_{12} + \gamma_2 C_4AH_{13} + \gamma_3 C_4AF + \gamma_4 C_3A$ und $q = 3\gamma_1 + 2\gamma_2 + 3\gamma_3 + 4\gamma_4$.

An dieser Stelle wird vereinfacht nur die Auflösung der C-S-H-Phasen nach Gleichung (7.6) betrachtet. Unter der Annahme der Zusammensetzung der C-S-H-Phasen als $C_3S_2H_3$ kann die normierte Reaktionsgleichung angegeben werden zu



D.h. pro mol Sulfationen wird 3,56 mol C-S-H umgesetzt und es entstehen 1,79 mol Gips. Es ist aus der Gleichung ersichtlich, dass auf jeden Fall Wasser vorhanden sein muss, damit die Reaktion ablaufen kann. Wenn Sulfat in fester Phase im Betongefüge enthalten sein sollte, z. B. aufgrund des Zuschlags, dann müssen die Sulfationen zuerst in Lösung gehen, damit der Prozess ablaufen kann. Bei einem externen Sulfatangriff werden die Sulfationen in der wässrigen Lösung transportiert.

Der limitierende Faktor bei der Ettringitbildung sind die frei verfügbaren Calciumaluminat, sodass auch die Reaktionsgleichung (7.7) entsprechend normiert wird



Die zeitliche Änderung der Konzentration der Sulfationen kann als Reaktion zweiter Ordnung dargestellt werden

$$\frac{\partial c(SO_4^{2-})}{\partial t} = -k \cdot c(C_3A) \cdot c(SO_4^{2-}), \quad (7.9)$$

da die Reaktionsgeschwindigkeit sowohl von der Konzentration der Sulfationen als auch von der Konzentration des Tricalciumaluminates abhängt. Der Parameter k wird wie in [12] zu $k = 80000 \text{ mm}^3/\text{mol}/\text{d}$ angesetzt.

Die Energieerhaltung des Systems erfordert die Erfassung der Wärmeenergie. Die Enthalpie der Reaktion von Tricalciumaluminat zu Ettringit kann nach Gleichung (6.6) angegeben werden zu

$$\Delta H(C_3A) = -437,4 \text{ kJ/mol},$$

woraus die Wärmemenge pro Mengeneinheit berechnet wird zu

$$Q(C_3A) = -1618,8 \text{ J/gC}_3\text{A}.$$

7.3.2 Schädigung

Die Sulfatlösung im Zementstein bewirkt eine mechanische Schädigung, die auch experimentell beobachtet werden kann. Die Probekörper werden in Sulfatlösung mit einer definierten Konzentration gelagert, sodass die äußeren Randbedingungen konstant sind. Nach unterschiedlichen Eintauchzeiten werden Druckversuche an den Probekörpern durchgeführt und die Druckfestigkeiten bestimmt. Das Verhältnis zur Druckfestigkeit der ungeschädigten Probe dient als Maß für die Schädigung.

In der Literatur sind Versuchsergebnisse vorhanden, die den Einfluss verschiedener Sulfatlösungen und unterschiedlichen Zementzusammensetzungen beschreiben. In Abbildung 7.16 ist die Druckfestigkeit eines Würfels nach Lagerung in unterschiedlichen Medien dargestellt. Primär ist zu erkennen, dass sowohl die Auswahl des Zements als auch die Konzentration der Lösung eine entscheidende Rolle spielt.

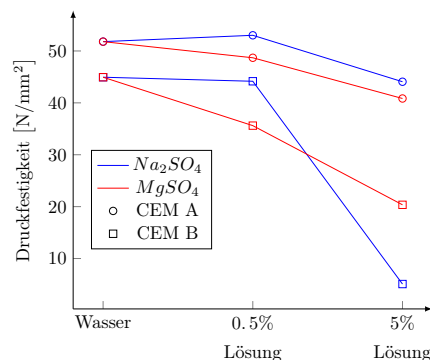


Abb. 7.16: Festigkeitsentwicklung unter Sulfatbeanspruchung nach [25]

Der CEM A repräsentiert hierbei einen Zement mit niedrigerem Calciumaluminatgehalt als CEM B. Des Weiteren ist zu erkennen, dass die Herkunft der Sulfationen einen Einfluss hat. Eine schwache Magnesiumsulfatlösung bewirkt eine größere Schädigung, als eine gleich schwache Natriumsulfatlösung. Stärkere Lösungen haben einen höheren Steifigkeitsabfall zur Folge, der zur einer signifikant abnehmenden Druckfestigkeit führt.

Im Modell wird dieser Sachverhalt in vereinfachter Form abgebildet. Unter der Annahme, dass die C-S-H-Phasen des Zementsteins maßgebend für die Festigkeit sind, wird eine Schädigung der Kontaktsteifigkeit formuliert mit

$$k_{n,s,t}(t) = k_{n,s,t}(t_0) \cdot \frac{c_{C-S-H}(t)}{c_{C-S-H}(t_0)}. \quad (7.10)$$

Bei vollständiger Auflösung der Hydratphasen führt dieses Kriterium zu einem vollständigen Steifigkeitsverlust. Im numerischen Modell wird die Schädigung lokal in jeder Prozesszone ausgewertet und die Steifigkeit des zugehörigen Kontaktes angepasst.

7.3.3 Anwendungsbeispiel

Das entwickelte Modell wird für die Berechnung eines Würfels mit einer Kantenlänge von $\ell = 50 \text{ mm}$ aufbereitet, vgl. Abbildung 7.17. Dort sind der Probekörper und die verwendete Korngrößenverteilung dargestellt.

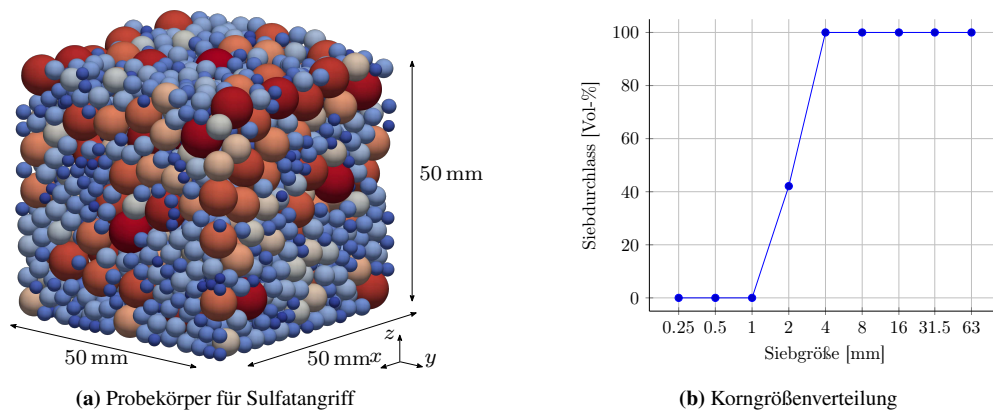


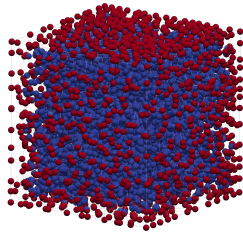
Abb. 7.17: Zusammensetzung und Eigenschaften des Probekörpers für den Sulfatangriff

In Abbildung 7.18a ist das extrahierte Poren-Netzwerk mit den dazugehörigen Randbedingungen dargestellt. Als Randbedingung für das Poren-Netzwerk werden unterschiedlich starke Konzentrationen an Sulfationen angesetzt. Die angegebenen Konzentrationen c_{1-3} entsprechen einer 0,5%igen, 5%igen und einer 12%igen Natriumsulfatlösung. Der Würfel liegt vollständig in der Lösung, sodass alle sechs Seiten des Würfels die gleiche Konzentration erhalten. Die molare Dichte der C-S-H-Phasen wird mit der molaren Masse

$M(C_3S_2H_3) = 342,18 \text{ g/mol}$ und der Dichte $\rho(C_3S_2H_3) = 2,65 \text{ g/cm}^3$ zu

$$\frac{2,65}{342,18} = 0,00774 \text{ mol/cm}^3 = 7,74 \cdot 10^{-6} \text{ mol/mm}^3$$

bestimmt. Der Anteil der C-S-H-Phasen am gesamten Zementsteinvolumen wird zu fünfzig Prozent angenommen. Die Berechnungen erfolgen für zwei verschiedene C_3A Konzentrationen $c_1(C_3A) = 25 \text{ mol/m}^3$ und $c_2(C_3A) = 100 \text{ mol/m}^3$, im Folgenden bezeichnet als CEM A und CEM B.



(a) Extrahiertes Poren-Netzwerk

$c_1(SO_4^{2-})$	$3,52 \cdot 10^{-8}$	[mol/mm ³]
$c_2(SO_4^{2-})$	$3,678 \cdot 10^{-7}$	[mol/mm ³]
$c_3(SO_4^{2-})$	$9,47 \cdot 10^{-7}$	[mol/mm ³]
D	0,07	[mm ² /d]
A	1	[mm ²]

(b) Randbedingungen

Abb. 7.18: Poren-Netzwerk und Randbedingungen für die Berechnung des Sulfatangriffs

Das Konzentrationsprofil über den Querschnitt kann mit der analytischen Lösung nach CRANK [17] verglichen werden. Die analytische Lösung für die eindimensionale Diffusion mit gleichen Randbedingungen auf beiden Seiten kann angegeben werden zu

$$\frac{C}{C_0} = 1 - \frac{4}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n(k + \nu)} \sin\left(\frac{n\pi X}{L}\right) (k + \nu) \exp(-T(k + \nu)) \quad (7.11)$$

mit $n = 2m + 1$ und $\nu = D \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$. Zusätzlich kann über den Faktor k die Reaktion der betrachteten Substanz erfasst werden. Die nachfolgenden Ergebnisse zeigen die reine Diffusion mit $k = 0$.

Die Konzentrationen entlang der Mittelachse des Würfels sind vergleichbar mit einem eindimensionalen Konzentrationsprofil und frei von Einflüssen aus den Eckbereichen. Der Diffusionskoeffizient beträgt $D = 0,07 \text{ mm}^2/\text{d}$. In Abbildung 7.19a ist ein Schnitt durch das Poren-Netzwerk dargestellt, der die charakteristische kreisförmige Ausbreitung der Sulfationen im Querschnitt zeigt. Im Diagramm 7.19b sind die Konzentrationsprofile der numerischen und analytischen Lösung entlang der Mittelachse in y-Richtung zu unterschiedlichen Zeitpunkten dargestellt. Das Konzentrationsprofil der numerischen Lösung zum Zeitpunkt $t = 730\text{d}$ zeigt geringe Abweichungen zur analytischen Lösung. Die anderen zwei dargestellten Zeitpunkte sind in guter Übereinstimmung mit der analytischen Lösung. Die Abweichungen können aus der expliziten Formulierung entstehen.

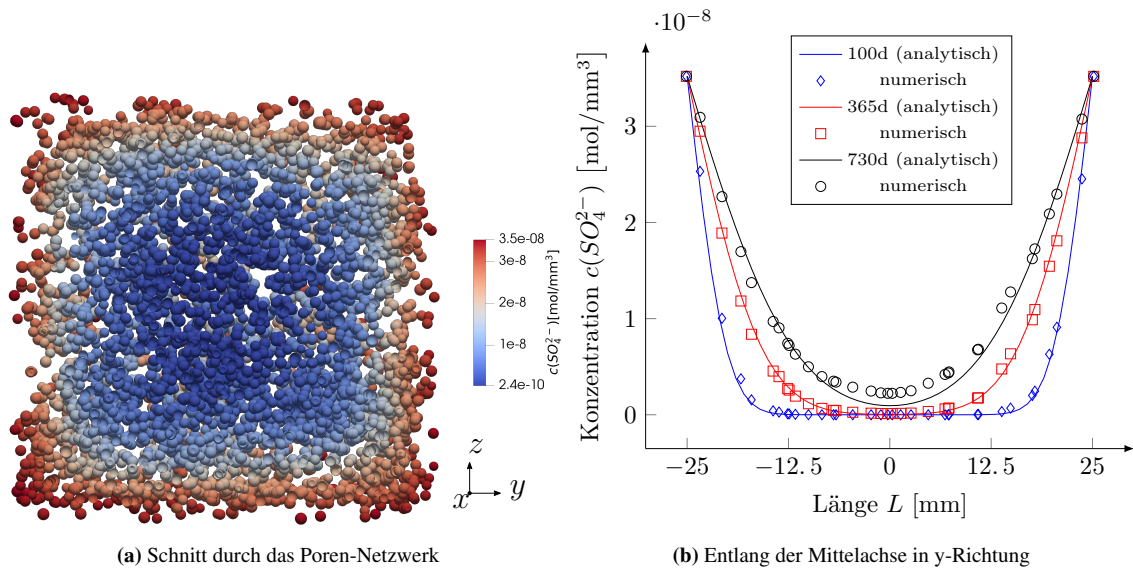


Abb. 7.19: Sulfatkonzentrationen im Probekörper

Im Vergleich zur reinen Diffusion sind in der Abbildung 7.20 die Konzentrationsprofile der Sulfationen mit und ohne Berücksichtigung der Reaktion dargestellt. Zu allen drei dargestellten Zeitpunkten ist ohne Berücksichtigung der chemischen Reaktionen eine erhöhte Konzentration festzustellen. Aufgrund der Reaktionen der Sulfationen mit Teilen des Zementsteins sinkt die Konzentration in den Poren und es müssen erst weitere Sulfationen durch das Porensystem diffundieren, um diesen Verlust auszugleichen.

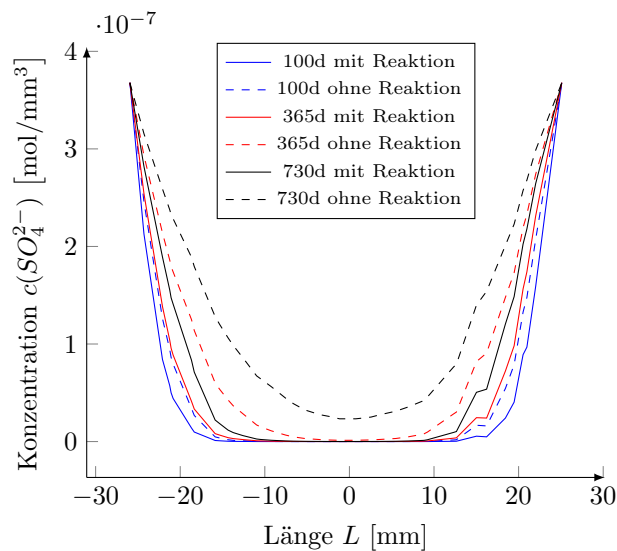


Abb. 7.20: Sulfationenkonzentration mit und ohne Berücksichtigung der Reaktion

Abbildungen 7.21 und 7.22 zeigen Schnitte durch das Kontaktnetzwerk der Packung nach unterschiedlichen Lagerungszeiten in 5%iger Natriumsulfatlösung für zwei Konzentrationen an C_3A . Dargestellt ist die prozentuale Reststeifigkeit in Normalenrichtung, jeweils

bezogen auf den chemisch ungeschädigten Ausgangszustand. Das Zentrum des Würfels ist auch nach zwei Jahren noch vollkommen intakt, vgl. Abbildung 7.21c und 7.22c. Die Schädigung bei einer geringen Konzentration an Tricalciumaluminat schreitet schneller voran.

Die Reaktionsfront in Bild 7.21c ist nach zwei Jahren bereits weiter fortgeschritten als die Reaktionsfront bei einer höheren Tricalciumaluminat-Konzentration in Bild 7.22c. Die Reaktion ist sowohl von Sulfationen als auch von Tricalciumaluminat abhängig. Ist ein Reaktionspartner nicht vorhanden, ist die Reaktionsgeschwindigkeit gleich null. Das bedeutet, dass in den Prozesszonen, wo kein freies C_3A mehr zur Verfügung steht, die Konzentration an Sulfationen steigt.

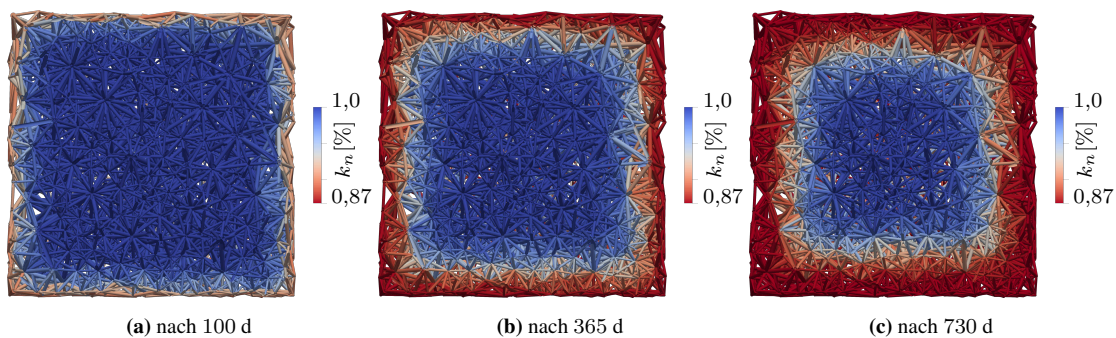


Abb. 7.21: Reststeifigkeit bei Lagerung in 5%iger Natriumsulfatlösung und $c(C_3A) = 25 \text{ mol/mm}^3$

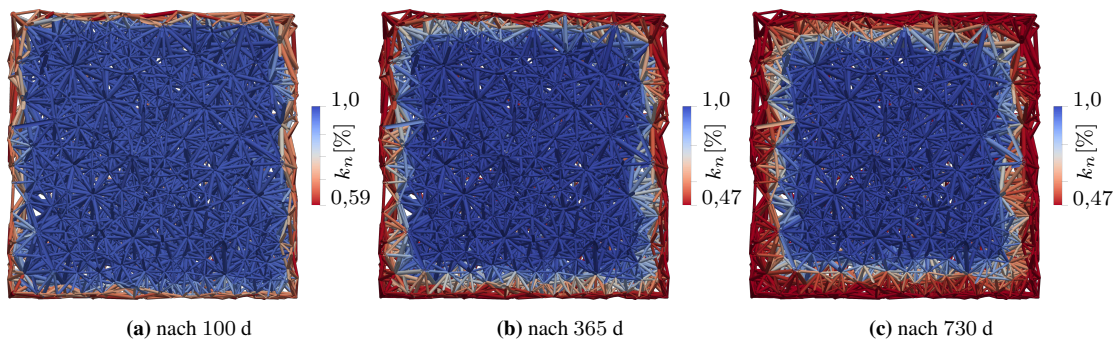


Abb. 7.22: Reststeifigkeit bei Lagerung in 5%iger Natriumsulfatlösung und $c(C_3A) = 100 \text{ mol/mm}^3$

Für einen Betonkörper mit einem geringen Gehalt an freien Tricalciumaluminaten, ist die Auswirkung einer Sulfatbelastung vergleichsweise gering. Dies ist an der maximalen Schädigung der Kontakte abzulesen. Die maximale Schädigung beträgt in diesem Beispiel 13%. Der höhere Gehalt schlägt sich einer Schädigung von über 50% nieder. Vor allen Dingen die Randbereiche sind nach einem Jahr schon stark geschädigt. In den Randbereichen steigt zudem die Schädigung nicht weiter an, wenn kein Tricalciumaluminat mehr zur Verfügung steht. Der Gehalt an freiem Tricalciumaluminat ist in Abbildung 7.23 zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. C_3A ist im Zementstein vorhanden und

nur aus Gründen der Darstellung hier an den Partikeln der Gesteinskörnung dargestellt. Die Gehalte entstammen aus der jeweils zu einem Partikel gehörenden VORONOI-Zelle. Vor Beginn der Lagerung in Natriumsulfatlösung ist noch im gesamten Querschnitt C_3A zu finden, vgl. Abbildung 7.23a. Mit Zunahme der Lagerungszeit sinkt der Gehalt an frei verfügbarem C_3A in den Randbereichen. Auch hier ist die zuvor beschriebene Reaktionsfront erkennbar.

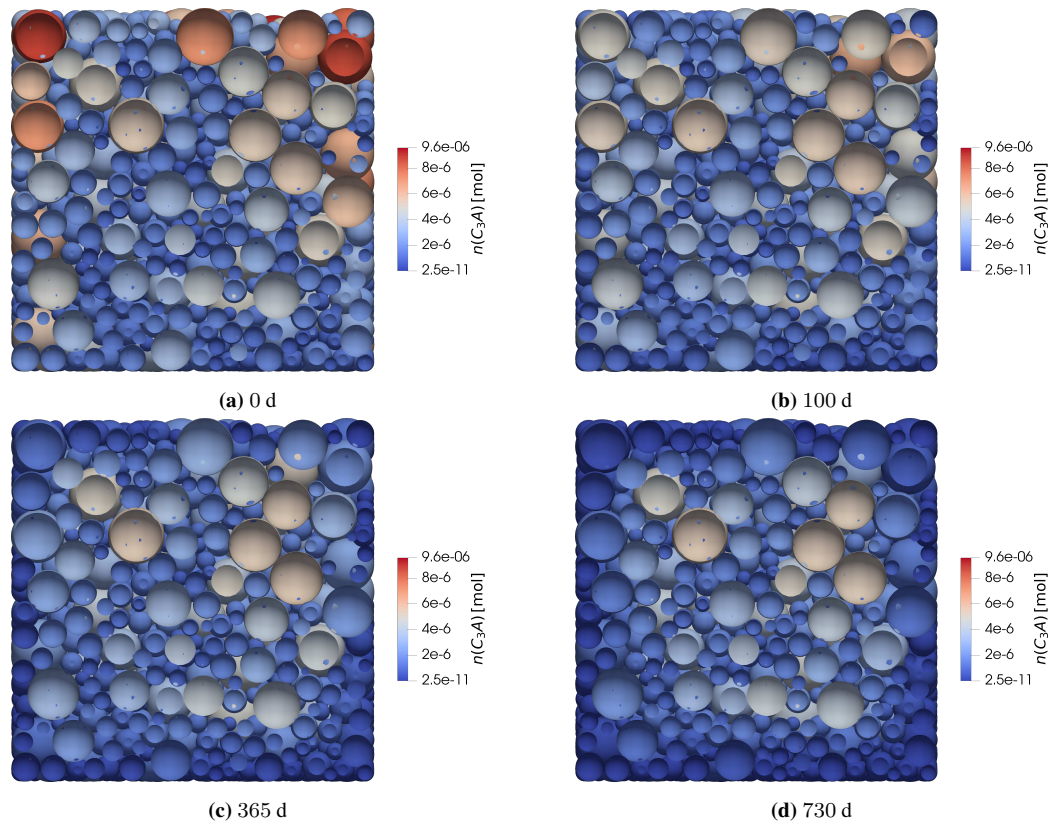


Abb. 7.23: Stoffmenge an C_3A im Querschnitt zu unterschiedlichen Zeitpunkten bei 5%tiger Na_2SO_4 -Lösung

Die Schädigung der lokalen Kontakte hat auch Auswirkungen auf die makroskopische Steifigkeit. Abbildung 7.24a zeigt die berechneten Steifigkeitswerte aus einem virtuellen Druckversuch für die Zemente CEM A und CEM B. Der CEM A mit dem kleineren Gehalt an C_3A zeigt eine Verringerung der Steifigkeit nach einem Jahr Lagerung in 5%iger Lösung von etwa 6%. Der höhere Gehalt an C_3A im CEM B bewirkt einen deutlich stärkeren Abfall nach einem Jahr um etwa 15%. Der CEM B ist bereits nach 100 d genauso stark geschädigt wie der CEM A nach einem Jahr.

Abbildung 7.24b zeigt den Einfluss der Lagerung in Natriumsulfatlösungen variierender Stärke für ein Jahr auf die makroskopische Steifigkeit. Eine höhere Verfügbarkeit an freien Tricalciumaluminaten in Verbindung mit einer hohen Konzentration an Sulfationen hat eine starke Schädigung der Partikelkontakte und damit einen starken Abfall der makro-

skopischen Steifigkeit zur Folge.

Der CEM A mit einer geringen Konzentration C_3A weist selbst bei einer verhältnismäßig hochprozentigen Natriumsulfatlösung nur einen Steifigkeitsabfall von etwa 8% auf. Im Vergleich dazu, ist bei der Verwendung von CEM B in Verbindung mit einer 12%igen Natriumsulfatlösung nur noch eine Reststeifigkeit von etwa 77% vorhanden.

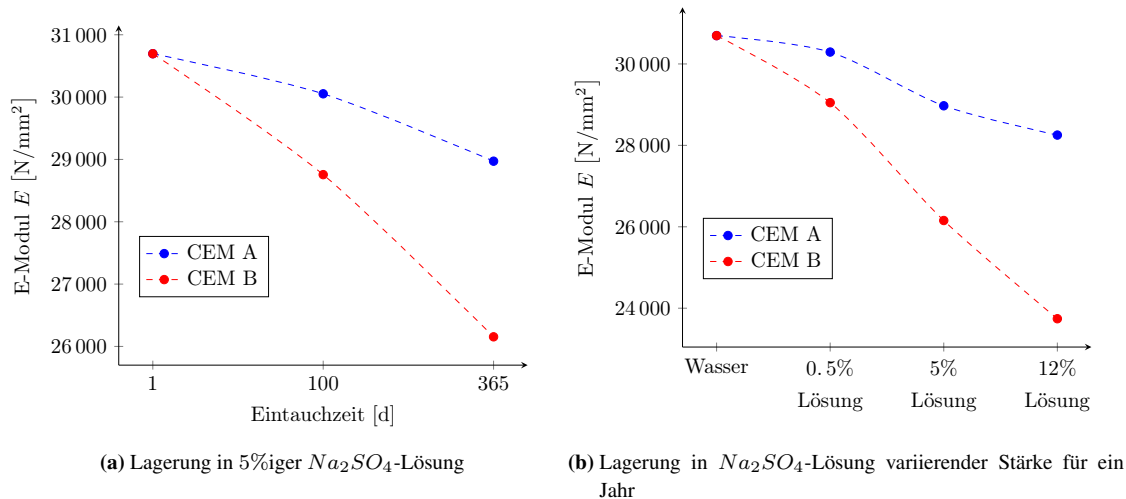


Abb. 7.24: Änderungen der makroskopischen Steifigkeit

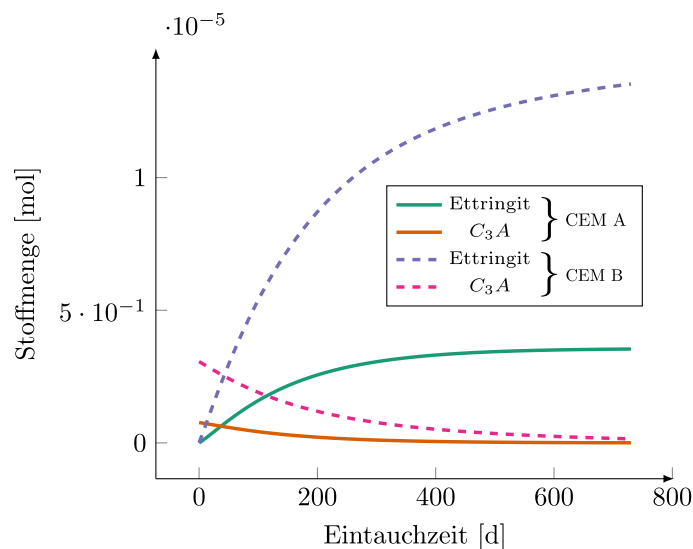


Abb. 7.25: Gehalt an Substrat für CEM A und CEM B an einem Partikel im Randbereich

In Abbildung 7.25 ist der Gehalt an C_3A und Ettringit an einem Partikel im Randbereich der Struktur über die Zeit für die zwei untersuchten Tricalciumaluminatgehalte dargestellt. Mit zunehmender Eintauchzeit reagiert das vorhandene C_3A mit den Sulfationen und der Gehalt strebt gegen null. Die abfallende Rate ist charakteristisch für eine Reaktion zweiter Ordnung. Die Bildung von Ettringit ist direkt gekoppelt mit dem Umsatz von

C_3A und steigt zu Beginn der Eintauchzeit stark an und strebt dann einem Sättigungswert entgegen. Der Sättigungswert ist erreicht, wenn in dem betrachteten Bereich kein Tricalciumaluminat mehr zur Verfügung steht.

Die Auswirkungen der chemischen Schädigung auf das Bruchbild sind Gegenstand der folgenden Untersuchungen. Die Würfel werden hierfür zu den bereits im Vorfeld genannten Zeitpunkten einem virtuellen Druckversuch unterzogen. Die Randbedingungen sind in Abbildung 7.26 gegeben. Hier wird alternativ zu der Belastung mit starren Wänden nach Abschnitt 3.4 auf die obere Schicht eine Geschwindigkeit aufgebracht die analog zu Abbildung 3.14 moduliert wird. Die Lagerung des Würfels ist zwängungsfrei.

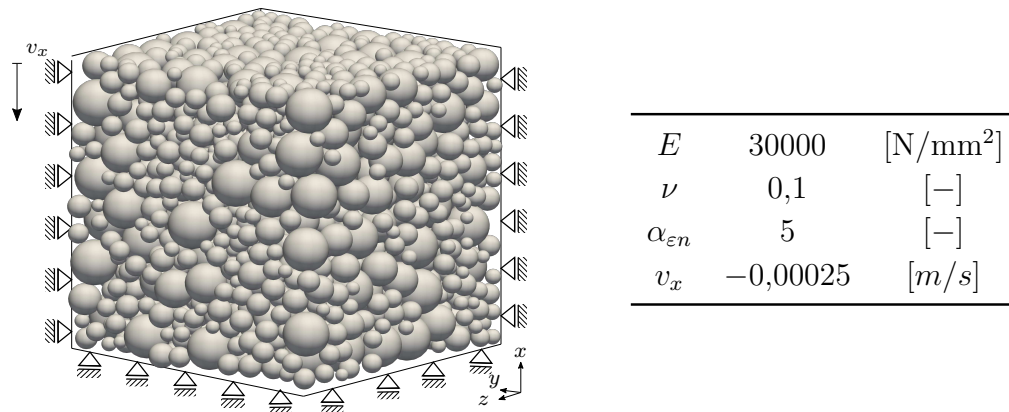


Abb. 7.26: Randbedingungen für Druckversuche

Zum Vergleich ist das Bruchbild für den Würfel ohne chemische Schädigung in Abbildung 7.27 gezeigt. Die gerissenen Kontakte sind in rot markiert. Zu erkennen sind Schubflächen, auf denen die oberen Teile abscheren.

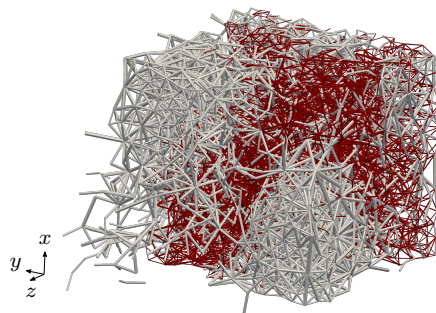


Abb. 7.27: Bruchbild ohne chemische Schädigung

Die Bruchbilder der beiden betrachteten Zemente CEM A und CEM B sind in der Abbildung 7.28 für Lagerungsdauern von 100 d bzw. 365 d dargestellt. Die Bruchbilder zeigen kleine Unterschiede, sind aber von der Phänomenologie des Bruchverhaltens vergleichbar. Dies ist auf die verhältnismäßig kleinen Steifigkeitsänderungen infolge der geringen Sulfationenkonzentration zurückzuführen.

Das dargestellte Modell kann die chemisch-mechanische Schädigung des Betonkörpers abbilden. Die Auswirkungen unterschiedlich starker Natriumsulfatlösungen auf die Tragfähigkeit und das Bruchbild von Betonwürfeln sind exemplarisch gezeigt.

Die Ettringitbildung infolge eines Sulfatangriffs ist mit einer Volumenzunahme verbunden. Die volumetrischen Verzerrungen und die mögliche Rissbildung müssen für eine vollständige Beschreibung des Sulfatangriffs noch ergänzt werden.

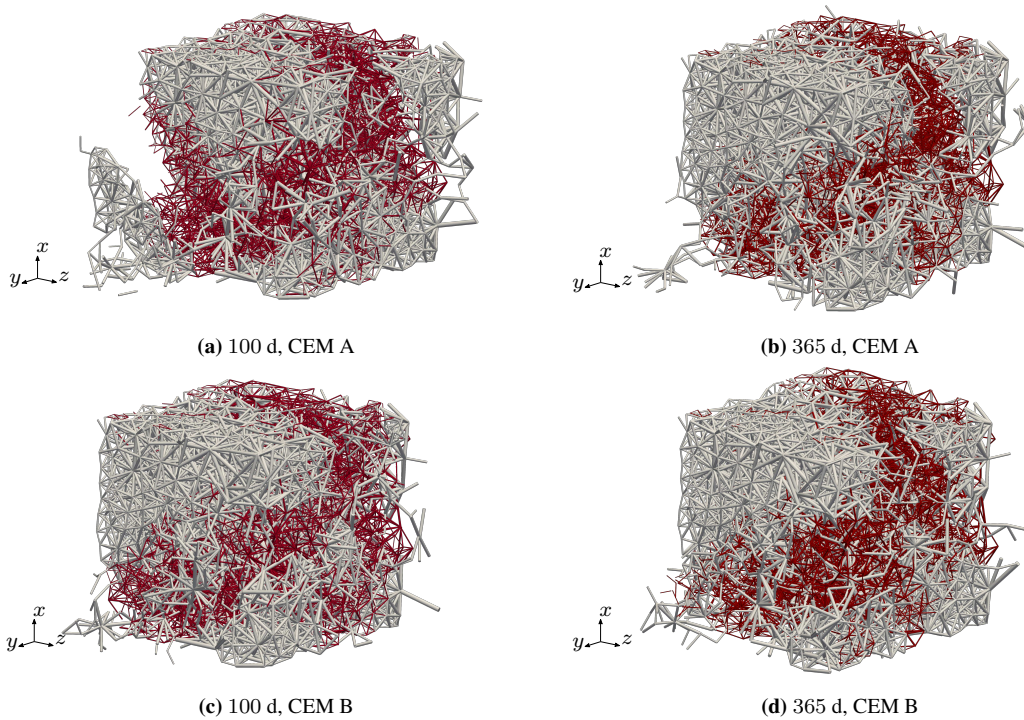


Abb. 7.28: Bruchbilder für 0,5% Natriumsulfatlösung

8 Zusammenfassung und Ausblick

Ein Bauwerk aus Beton muss standsicher, dauerhaft und wirtschaftlich sein. Viele Aspekte wie beispielsweise der Standort und die daraus anzusetzenden Randbedingungen spielen eine wesentlich Rolle im Bemessungsprozess. Die Erfassung und Bewertung der vielschichtigen Einwirkungen auf den Beton ist daher umso wichtiger. Numerische Modelle können helfen, den Baustoff besser zu verstehen und ggf. zu optimieren. Die hohe Anzahl an Bestandsbauwerken erfordert die Erfassung von Alterungsprozessen sowie deren Auswirkungen auf die (Rest-) Lebensdauer des Tragwerks.

Aus dieser Motivation heraus wird in der vorliegenden Arbeit ein Modell für Beton auf der Mesoebene entwickelt. Die DEM wird zur Beschreibung der heterogenen Gefügestruktur eingesetzt. Partikelpackungen mit verschiedenen Korngrößenverteilungen werden untersucht und bewertet. Die Auswirkungen mikroskopischer Parameter auf das makroskopische (Bruch-) Verhalten sind dargestellt.

Ein Fokus bei der Entwicklung des Modells liegt auf der Formulierung der Kopplungsbedingungen zwischen dem chemischen, thermischen und mechanischen Feld. Die Temperatur verursacht thermische Dehnungen und ist als zusätzlicher Freiwert an jedem Partikel definiert. Instationäre Temperaturverteilungen infolge eines Brandfalls werden berechnet und Abplatzphänomene infolge starker Temperaturgradienten dargestellt.

Die Temperatur beeinflusst die Geschwindigkeit chemischer Reaktionen und wird in der Reaktionskinetik berücksichtigt. Über die Reaktionsenthalpie wird die Temperaturänderung infolge einer chemischen Reaktion erfasst. Als Beispiel für die chemisch-thermische Kopplung sind die Hydratationsreaktionen dargestellt.

Das chemische Feld ist einseitig an das mechanische Feld gekoppelt. Chemische Reaktionen können eine Veränderung des Zementsteins bewirken. Lokale Steifigkeitsänderungen können im Modell direkt erfasst werden. Der Transport von (schädigenden) Substanzen wird über ein Poren-Netzwerk realisiert, das mittels einer VORONOI-Tessellation erzeugt wird. Der Sulfatangriff auf Beton wird als Beispiel eines lösenden Angriffs gezeigt und die chemisch-thermisch-mechanische Kopplung demonstriert.

Das entwickelte Modell kann die Prozesse auf der Meso- bzw. Mikroskala abbilden. Die Erfassung von weiteren Alterungsprozessen und die Kopplung an experimentelle Strukturuntersuchungen mit einem Computertomographen wird für die Erstellung von Prognosemodellen als sinnvoll erachtet.

Das Poren-Netzwerk ist in der vorliegenden Fassung noch nicht an das Rissverhalten gekoppelt. Eine Anpassung der Poren im Rissbereich ist notwendig für eine vollständige Beschreibung von Schädigungsprozessen. Bei großen Verformungen der Packung muss die Lage der Poren ebenfalls angepasst werden.

Der hohe numerische Aufwand lässt allerdings nur die Berechnung von verhältnismäßig

kleinen Probekörpern zu. Eine konsequente Parallelisierung des Programms und effiziente Algorithmen können zu verkürzten Berechnungszeiten beitragen.

Die diskreten Elemente Methoden sind nicht auf perfekt runde Partikel begrenzt. Es können beliebige Formen verwendet werden, wenn die Kontaktsuche entsprechend angepasst wird. Wird mit einer Partikelpackung aus runden Partikeln eine VORONOI-Tessellation durchgeführt, dann können die entstehenden VORONOI-Zellen als diskrete Elemente interpretiert werden. Hier ist eine direkte Kopplung mit der Finiten Elemente Methode möglich. Mit neuartiger Elementtechnologie können polygonale finite Elemente zur Berechnung genutzt werden. In der Literatur werden diese Verfahren als Virtuelle Element Methoden (VEM) bezeichnet [8]. Vorstellbar ist die kontinuumsmäßige Beschreibung mit der VEM, wobei die zugrundeliegenden VORONOI-Zellen aus der DEM-Simulation stammen.

Notation

Allgemein

a, a	Skalar bzw. Tensor 0. Stufe
\mathbf{a}	Vektor bzw. Tensor 1. Stufe
\mathbf{A}	Matrix bzw. Tensor 2. Stufe
\mathbf{A}^T	Transponierte Matrix
$\mathbf{a} \mathbf{b}, \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	Skalarprodukt
$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$	Kreuzprodukt
$ \mathbf{a} $	Betrag von \mathbf{a}
$ \mathbf{a} $	Euklidische Norm von \mathbf{a}
$\frac{\partial}{\partial a}$	Partielle Ableitung nach a
$\dot{\mathbf{a}}$	Zeitableitung von \mathbf{a}
\mathcal{O}	Ordnung

Indizes

n, s, t	Lokale Richtungen
ges	gesamt
vc	VORONOI-Zelle
p	Partikel
i, j	Partikel
x, y, z	Globale Richtungen
ref	Referenz
lo	lokal
rel	relativ
ck, cyl	charakteristischer Druck, Zylinder
ct	charakteristischer Zug
RVE	repräsentatives Volumenelement

Skalare

k	Federsteifigkeit
d	Dämpfungskonstante
l_c	Abstand zwischen zwei Partikeln

r	Radius
δ	Relativverschiebung
ω	Winkelgeschwindigkeit
f	Kraft
Δt	Zeitschrittweite
α_d	LEHRsches Dämpfungsmaß
$\alpha_{\varepsilon n}, \alpha_{\varepsilon s}$	Modellparameter des Bruchkriteriums
α_T	Wärmeausdehnungskoeffizient
m	Masse
E	Elastizitätsmodul
ν	Querdehnzahl
Z	Koordinationszahl
R	Interaktionsfaktor
μ	Reibbeiwert
σ	Spannung
u	Verschiebung
D	Diffusionskoeffizient
C_v	spezifische Wärmekapazität
C	Konzentration
V	Volumen
M	Molares Volumen
E_A	Aktivierungsenergie
H	Bindungsenthalpie
G	Gibbsche Energie
S	Entropie
ρ	Dichte
η	Wärmewiderstand
Q	Thermische Leistung
v	Geschwindigkeit
Δr	Änderung des Radius

Vektoren

\mathbf{b}	Richtungsvektor Randbedingungen
\mathbf{e}	Lokaler Richtungsvektor
\mathbf{f}	Kraftvektor
$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$	Basisvektoren des \mathbb{R}^3
\mathbf{m}	Momentenvektor
\mathbf{x}	Position

$\dot{\mathbf{x}}$	Geschwindigkeit
$\ddot{\mathbf{x}}$	Beschleunigung

Matrizen

\mathbf{M}	Massenmatrix
\mathbf{R}	Rotationsmatrix
$\boldsymbol{\sigma}$	Spannungstensor

Literaturverzeichnis

- [1] DIN EN 12390-3:2017-09, Prüfung von Festbeton - Teil 3: Druckfestigkeit von Probekörpern. Tech. rep., Beuth Verlag GmbH.
- [2] DIN EN 1991-1-2/NA:2015-09, Nationaler Anhang - National festgelegte Parameter - Eurocode 1: Einwirkungen auf Tragwerke - Teil 1-2: Allgemeine Einwirkungen - Brandeinwirkungen auf Tragwerke.
- [3] PFC - Particle Flow Code, Ver. 5.0. Itasca Consulting Group, Inc., 2015.
- [4] ANDRÉ, D., LEVRAUT, B., TESSIER-DOYEN, N., AND HUGER, M. A discrete element thermo-mechanical modelling of diffuse damage induced by thermal expansion mismatch of two-phase materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 318 (2017), 898–916.
- [5] BAKKE, S., ØREN, P.-E., ET AL. 3-D pore-scale modelling of sandstones and flow simulations in the pore networks. *Spe Journal* 2, 02 (1997), 136–149.
- [6] BAŽANT, Z. P., AND GAMBAROVA, P. G. Crack Shear in Concrete: Crack Band Microplane Model. *Journal of Structural Engineering* 110, 9 (1984), 2015–2035.
- [7] BAŽANT, Z. P. Analysis of Pore Pressure, Thermal Stress and Fracture in Rapidly Heated Concrete. *International Workshop on Fire Performance of High-Strength Concrete* (1997), 155–164.
- [8] BEIRÃO DA VEIGA, L., BREZZI, F., CANGIANI, A., MANZINI, G., MARINI, L. D., AND RUSSO, A. Basic Principles Of Virtual Element Methods. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 23, 01 (2013), 199–214.
- [9] BENTZ, D. P. *A Three-Dimensional Cement Hydration and Microstructure Program. I. Hydration Rate, Heat of Hydration, and Chemical Shrinkage*. US Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, 1995.
- [10] BENTZ, D. P. Three-Dimensional Computer Simulation of Portland Cement Hydration and Microstructure Development. *Journal of the American Ceramic Society* 80, 1 (1997), 3–21.
- [11] BERNARD, O., ULM, F.-J., AND LEMARCHAND, E. A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials. *Cement and Concrete Research* 33, 9 (2003), 1293–1309.
- [12] CEFIS, N., AND COMI, C. Damage modelling in concrete subject to sulfate attack. *Frattura ed Integrità Strutturale*, 29 (2014).
- [13] CHANG, C. S., CHAO, S. J., AND CHANG, Y. Estimates of elastic moduli for granular material with anisotropic random packing structure. *International Journal of Solids and Structures* 32, 14 (1995), 1989–2008.

- [14] CHAREYRE, B., CORTIS, A., CATALANO, E., AND BARTHÉLEMY, E. Pore-Scale Modeling of Viscous Flow and Induced Forces in Dense Sphere Packings. *Transport in Porous Media* 94, 2 (2012), 595–615.
- [15] CHATFIELD, C. *The Analysis of Time Series An Introduction, Sixth Edition*. CRC Press, Hoboken, 2013.
- [16] CRAMER, F. *Mehrfeld-Modell für chemisch-physikalische Alterungsprozesse von Beton*. Dissertation, Braunschweig, 2016.
- [17] CRANK, J. *The Mathematics of Diffusion*, 2d ed ed. Clarendon Press, Oxford, [Eng], 1975.
- [18] CUNDALL, P. A., AND STRACK, O. D. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique* 29, 1 (1979), 47–65.
- [19] FATT, I., ET AL. The network model of porous media.
- [20] FENG, Y., HAN, K., LI, C., AND OWEN, D. Discrete thermal element modelling of heat conduction in particle systems: Basic formulations. *Journal of Computational Physics* 227, 10 (2008), 5072–5089.
- [21] FREDERIKSEN, J. M., MEJLBRO, L., AND NILSSON, L.-O. Fick’s 2nd law - Complete solutions for chloride ingress into concrete – with focus on time dependent diffusivity and boundary condition. Tech. rep., Division of Building Materials, LTH, Lund University, 2009.
- [22] FU, Y., AND LI, L. Study on mechanism of thermal spalling in concrete exposed to elevated temperatures. *Materials and Structures* 44, 1 (2011), 361–376.
- [23] GONG, F., ZHANG, D., SICAT, E., AND UEDA, T. Empirical Estimation of Pore Size Distribution in Cement, Mortar, and Concrete. *Journal of Materials in Civil Engineering* 26, 7 (2014).
- [24] GOSTICK, J. T., KHAN, Z. A., TRANTER, T. G., KOK, M. D. R., AGNAOU, M., SADEGHI, M., AND JERVIS, R. PMEAL/porespy: Journal of Open Source Software Release. Zenodo, 2019.
- [25] HEWLETT, P. C. *Lea’s Chemistry of Cement and Concrete*. Elsevier Butterworth-Heinmann, Oxford, 2004.
- [26] IDIART, A. E., LÓPEZ, C. M., AND CAROL, I. Chemo-mechanical analysis of concrete cracking and degradation due to external sulfate attack: A meso-scale model. *Cement and Concrete Composites* 33, 3 (2011), 411–423.

- [27] JENSEN, R. P., BOSSCHER, P. J., PLESHA, M. E., AND EDIL, T. B. DEM simulation of granular media—structure interface: Effects of surface roughness and particle shape. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 23, 6 (1999), 531–547.
- [28] KALIFA, P., MENNETEAU, F.-D., AND QUENARD, D. Spalling and pore pressure in HPC at high temperatures. *Cement and Concrete Research* 30, 12 (2000), 1915–1927.
- [29] KANSAL, A. R., TORQUATO, S., AND STILLINGER, F. H. Computer generation of dense polydisperse sphere packings. *The Journal of Chemical Physics* 117, 18 (2002), 8212–8218.
- [30] KRAUSS, H.-W. *Zur Auswirkung hochfeiner inerter Zusatzstoffe auf die Hydrationskinetik und die Mikrostruktur von Zementstein*. Dissertation, Braunschweig, 2013.
- [31] KUHL, E., D’ADDETTA, G. A., LEUKART, M., AND RAMM, E. Microplane modelling and particle modelling of cohesive-frictional materials. In *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive-Frictional Materials*, vol. 568. Springer Berlin Heidelberg, 2001, pp. 31–46.
- [32] KULIK, D. A., WAGNER, T., DMYTRIEVA, S. V., KOSAKOWSKI, G., HINGERL, F. F., CHUDNENKO, K. V., AND BERNER, U. R. GEM-Selektor geochemical modeling package: Revised algorithm and GEMS3K numerical kernel for coupled simulation codes. *Computational Geosciences* (2012).
- [33] LE, L. *Micro-Level Porosimetry of Virtual Cementitious Materials: Structural Impact on Mechanical and Durability Evolution*. 2015.
- [34] LOTHENBACH, B., AND WINNEFELD, F. 4. Thermodynamic modelling of cement hydration: Portland cements – blended cements – calcium sulfoaluminate cements. In *Cementitious Materials*, H. Pöllmann, Ed. De Gruyter, Berlin, Boston, 2017, pp. 103–144.
- [35] MEINHARD, K., AND LACKNER, R. Multi-phase hydration model for prediction of hydration-heat release of blended cements. *Cement and Concrete Research* 38, 6 (2008), 794–802.
- [36] MIER, J. J. V. Strain-softening of concrete under multiaxial loading conditions, 1984.
- [37] MONAGHAN, J. Smoothed Particle Hydrodynamics and Its Diverse Applications. *Annual Review of Fluid Mechanics* 44, 1 (2012), 323–346.

- [38] MORFA, C. R., CORTÉS, L. A., DE FARIAS, M. M., MORALES, I. P. P., VALE-
RA, R. R., AND OÑATE, E. Systemic characterization and evaluation of particle
packings as initial sets for discrete element simulations. *Computational Particle
Mechanics* (2017).
- [39] NITKA, M., AND TEJCHMAN, J. Modelling of concrete behaviour in uniaxial com-
pression and tension with DEM. *Granular Matter* 17, 1 (2015), 145–164.
- [40] OCKELMANN, F. *Modellierung und numerische Analyse von Beton und faserver-
stärktem Ultrahochleistungsbeton mit der Diskrete Elemente Methode (Nr. 2018-
122)*. Dissertation, Braunschweig, 2018.
- [41] OGARKO, V., AND LUDING, S. A fast multilevel algorithm for contact detection of
arbitrarily polydisperse objects. *Computer Physics Communications* 183, 4 (2012),
931–936.
- [42] OSTERMANN, L. *Hochtemperaturverhalten von Beton: gekoppelte Mehrfeld-
Modellierung und numerische Analyse*. Dissertation, Braunschweig, 2012.
- [43] PAUL, S., ROY, S., GHOSH, P., FAGHIHI ZARANDI, M. A., CENDER, T., AND
PILLAI, K. M. A Novel Method for Permeability Estimation from Micro-
tomographic Images. *Transport in Porous Media* (2018).
- [44] POTYONDY, D., AND CUNDALL, P. A bonded-particle model for rock. *Internatio-
nal Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 41, 8 (2004), 1329–1364.
- [45] RANAIVOMANANA, H., VERDIER, J., SELIER, A., AND BOURBON, X. To-
ward a better comprehension and modeling of hysteresis cycles in the water sorpti-
on–desorption process for cement based materials. *Cement and Concrete Research*
41, 8 (2011), 817–827.
- [46] RAOOF, A., NICK, H., HASSANIZADEH, S., AND SPIERS, C. PoreFlow: A com-
plex pore-network model for simulation of reactive transport in variably saturated
porous media. *Computers & Geosciences* 61 (2013), 160–174.
- [47] REGNIER, P., O’KANE, J., STEEFEL, C., AND VANDERBORGHT, J. Modeling
complex multi-component reactive-transport systems: Towards a simulation envi-
ronment based on the concept of a Knowledge Base. *Applied Mathematical Model-
ling* 26, 9 (2002), 913–927.
- [48] ROSTÁSY, F. S., WARNECKE, P., AND PUSCH, U. *Zugfestigkeit von Konstrukti-
onsleichtbeton und Normalbeton bei sehr tiefen Temperaturen : Abschlussbericht*.
Institut für Baustoffe, Massivbau und Brandschutz, Braunschweig, 1988.
- [49] RYCROFT, C. H. *Multiscale Modeling in Granular Flow*. Dissertation, Massachu-
setts Institute of Technology, 2007.

- [50] SAUCIER, R. Computer generation of statistical distributions. Tech. rep., Army Research Lab Aberdeen Proving Ground MD, 2000.
- [51] STARK, J., AND WICHT, B. *Dauerhaftigkeit von Beton*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2013.
- [52] STEFFENS, A. *Modellierung von Karbonatisierung und Chloridbindung zur numerischen Analyse der Korrosionsgefährdung der Betonbewehrung*. Dissertation, Braunschweig, 2000.
- [53] TACKE, R. *Feuchte- und Festigkeitsentwicklung hydratisierenden Betons: Modellierung und numerische Analyse*. Dissertation, Braunschweig, 2002.
- [54] TAVAREZ, F. A., AND PLESHA, M. E. Discrete element method for modelling solid and particulate materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 70, 4 (2007), 379–404.
- [55] TIXIER, R., AND MOBASHER, B. Modeling of damage in cement-based materials subjected to external sulfate attack. I: Formulation. *Journal of Materials in Civil Engineering* 15, 4 (2003), 305–313.
- [56] TIXIER, R., AND MOBASHER, B. Modeling of damage in cement-based materials subjected to external sulfate attack. II: Comparison with experiments. *Journal of materials in civil engineering* 15, 4 (2003), 314–322.
- [57] TOXVAERD, S., HEILMANN, O. J., AND DYRE, J. C. Energy conservation in molecular dynamics simulations of classical systems. *The Journal of Chemical Physics* 136, 22 (2012), 224106.
- [58] VERLET, L. Computer 'Experiments' on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physical Review* 159, 1 (1967), 98–103.
- [59] VICENTE, M. A., GONZÁLEZ, D. C., AND MÍNGUEZ, J. Recent advances in the use of computed tomography in concrete technology and other engineering fields. *Micron* 118 (2019), 22–34.
- [60] VORONOI, G. Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. Premier mémoire. Sur quelques propriétés des formes quadratiques positives parfaites. *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 133 (1908), 97–178.
- [61] ŠMILAUER, V. *Cohesive Particle Model Using the Discrete Element Method on the Yade Platform*. Dissertation, Université de Grenoble; Czech Technical University in Prague, 2010.
- [62] WANG, L., AND UEDA, T. Mesoscale modelling of the chloride diffusion in cracks and cracked concrete. *Journal of Advanced Concrete Technology* 9, 3 (2011), 241–249.

- [63] WEAST, R. C., Ed. *CRC Handbook of Chemistry and Physics: A Ready-Reference Book of Chemical and Physical Data*, 63. ed ed. CRC Press, Boca Raton, Fla, 1983.
- [64] ZEMENTWERKE, V. D. *Zement-Taschenbuch 2002. 50. Auflage. Düsseldorf: Verlag Bau und Technik* (2002).

Berichte aus dem Institut für Statik ab 2007

- Nr. 2007-105 C. LEPPERT: Mehrphasenmodell für granulare Medien zur numerischen Untersuchung des Phasenübergangs bei der Entleerung von Silos
- Nr. 2007-106 V. KRASE: Stability of Municipal Solid Waste Landfills
- Nr. 2007-107 J. PONTOW: Imperfektionsempfindlichkeit und Grenzlasten von Schalentragsystemen
- Nr. 2009-108 M. BECKMANN: Ein gradientenabhängiges Modell für anisotrope Schädigung von Beton unter Berücksichtigung von Porendruck
- Nr. 2010-109 P. SUN: Fluid-Struktur-Wechselwirkung mit aktiver Schwingungskontrolle durch piezoelektrische Materialien
- Nr. 2010-110 J. VELDE: 3D Nonlocal Damage Modeling for Steel Structures under Earthquake Loading
- Nr. 2010-111 K. SCHUSTER: Systemidentifikation und Bauwerksüberwachung mit piezokeramischen Aktuatoren
- Nr. 2011-112 S. BENTE: Interaction of Degradation, Deformation and Transport Processes in Municipal Solid Waste Landfills
- Nr. 2011-113 L. OSTERMANN: Hochtemperaturverhalten von Beton – Gekoppelte Mehrfeld-Modellierung und numerische Analyse
- Nr. 2012-114 B. BRODERSEN: Modellierung des thermo-mechanischen Verbundverhaltens von Asphalt in Straßenaufbauten
- Nr. 2012-115 J. KINDLEIN: Gekoppelte Analyse von Reaktions- und Transportprozessen in Deponiestrukturen
- Nr. 2015-116 F. PASENOW: Modellierung oberflächengekoppelter Mehrfeldsysteme und numerische Analyse rutschender Bodenmaterialien
- Nr. 2015-117 M. SCHAUER: Ein effizienter gekoppelter FEM-SBFEM Ansatz zur Analyse von Boden-Bauwerk-Interaktionen im Zeitbereich
- Nr. 2016-118 A. ALFARRA: Numerische Analyse von Bauwerk-Wind-Wechselwirkungen mit RANS-Turbulenzmodellen
- Nr. 2016-119 S. REINSTÄDLER: Modellierung und numerische Analyse der Entleerung von dünnwandigen Silos
- Nr. 2016-120 F. CRAMER: Mehrfeld-Modell für chemisch-physikalische Alterungsprozesse von Beton
- Nr. 2018-121 T. BLUME: Mikromechanisch begründete Modellbildung des thermo-mechanischen Werkstoffverhaltens von Asphalt
- Nr. 2018-122 F. OCKELMANN: Modellierung und numerische Analyse von Beton und faserverstärktem Ultrahochleistungsbeton mit der Diskrete Elemente Methode
- Nr. 2019-123 A. GAFOOR: Modeling and numerical analysis of damage behavior of concrete
- Nr. 2019-124 H-H. HERMERSCHMIDT: Entwicklung eines Berechnungsmodells zur Untersuchung der Strömungsvorgänge an Überfallschütz und drehendem Schaufelwasserrad

Sonderdrucke

Phänomenologische Modelle für Werkstoffe des Bauwesens.

Hermann Ahrens zum 60. Geburtstag (1998).

Herausgeber: D. Dinkler, U. Kowalsky.

Baustatik-Baupraxis 8.

Berichte der Fachtagung am 21. und 22. März 2002 in Braunschweig.

Herausgeber: D. Dinkler.

Institut für Statik, Technische Universität Braunschweig

Beethovenstraße 51, 38106 Braunschweig, Deutschland

Telefon +49 (0)531 / 391-3667, Telefax +49 (0)531 / 391-8116

E-Mail statik@tu-bs.de, Homepage <https://www.tu-braunschweig.de/statik>